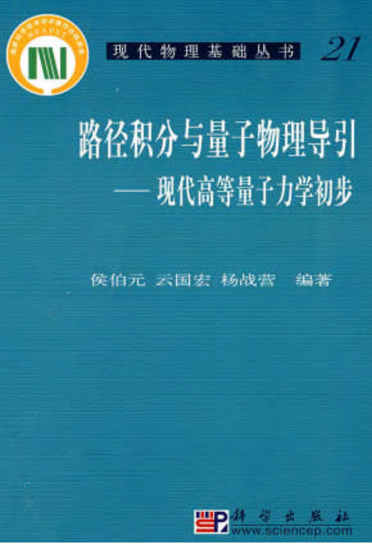

现代物理基础丛书 21
路径积分与量子物理导引
——现代高等量子力学初步
侯伯元 云国宏 杨战营 编著
科学出版社
www.sciencep.com

国家科学技

费恩曼路径积
及非线性物理等领
生院、西北大学、

量子物理作为现代

杂性和奇异性作了简
了路径积分理论的半
章简单地讨论了路径
5 章分析了一般坐标
径积分意义下氢原子
其在多连通空间上的

引 言

经典力学与量子力学的若干基本表述

在正式介绍路径积分理论之前, 作为预备知识, 首先对经典力学与量子力学的若干基本表述做个简短回顾, 介绍一下经典力学的三种表述方案, 以及从经典力学过渡到量子力学的三种途径, 最后着重强调一下路径积分量子化的特点和重要性.

一、经典力学的三种表述方案

1. 最小作用量原理与欧拉-拉格朗日方程

经典力学的第一种表述方案建立在位形空间描述下的拉格朗日力学体系. 在这种表述中, 粒子运动的轨道 $q(t)$ 及速度 $\dot{q}(t)$ 是位形空间上的动力学变量, 它们随时间的演化由运动方程 (运动规律) 来决定, 而运动方程可由最小作用量原理导出.

拉格朗日力学体系的运动规律完全由体系的拉格朗日 (Lagrange) 函数 (拉氏量) L 决定. L 的形式为

$$L = L(q(t), \dot{q}(t), t),$$

它是一组广义坐标 $q(t)$ 和广义速度 $\dot{q}(t)$ 的函数. 拉氏量对时间积分称为作用量 S, 即

$$S = \int_{t_i}^{t_f} L(q(t), \dot{q}(t), t)\mathrm{d}t = S[q(t)], \tag{1}$$

它是轨道 $q(t)$ 的泛函.

经典力学体系运动的实际轨道由最小作用量原理决定, 具体表述为: 当力学体系的初态位置 $q_i = q(t_i)$ 与终态位置 $q_f = q(t_f)$ 完全确定后, 力学体系的拉氏量 L 沿实际轨道 $q(t)$ 的时间积分取稳定极值, 或者说, 沿实际运动轨道 $q(t)$, 作用量泛函 $S[q(t)]$ 取极值

$$\delta S[q(t)] = 0.$$

由变分法知

$$\begin{aligned}\delta S[q(t)] &= \int_{t_i}^{t_f} \sum_j \left(\frac{\partial L}{\partial q_j}\delta q_j + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}\delta \dot{q}_j\right)\mathrm{d}t \\ &= \int_{t_i}^{t_f} \sum_j \left[\left(\frac{\partial L}{\partial q_j}\right)\delta q_j + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}\delta q_j\right) - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}\right)\delta q_j\right]\mathrm{d}t\end{aligned}$$

$$= \sum_j \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}\right) \delta q_j \Big|_{t_i}^{t_f} + \int_{t_i}^{t_f} \sum_j \left[\frac{\partial L}{\partial q_j} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}\right)\right] \delta q_j \mathrm{d}t, \tag{2}$$

由于在两个端点 $\delta q(t_i) = \delta q(t_f) = 0$, 且 δq_j 为任意选取的变分, 所以要使作用量的变分为零, 只有 (2) 式第二项中的被积函数为零, 即力学体系的实际运动轨道应满足欧拉–拉格朗日方程

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} - \frac{\partial L}{\partial q_j} = 0. \tag{3}$$

这便是拉格朗日力学体系的运动方程 (运动规律).

欧拉–拉格朗日方程与牛顿运动方程等价. 以质点在外力场中的运动为例, 牛顿运动方程为

$$m\ddot{x} = -\frac{\partial V(x)}{\partial x}. \tag{4}$$

另一方面, 该力学体系的拉氏量为

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x), \tag{5}$$

作用量泛函为

$$S[x(t)] = \int \mathrm{d}t \left[\frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x)\right],$$

这样, 在边界固定的条件下, 利用作用量极值条件 $\delta S = 0$ 可得欧拉–拉格朗日方程 (3) 式, 再将拉氏量 (5) 式代入, 同样可得牛顿运动方程 (4) 式.

2. 哈密顿量与正则运动方程

经典力学的第二种表述方案是建立在相空间描述下的哈密顿力学体系. 在拉格朗日力学体系中, 是将广义坐标与广义速度作为独立变量来描述力学体系的运动状态, 而在哈密顿力学体系中, 描述体系运动状态的独立变量则是广义坐标和广义动量. 给定体系的拉氏量 $L(q(t), \dot{q}(t), t)$, 与广义坐标变量共轭对应的广义动量定义为

$$p_j = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}, \tag{6}$$

这时体系的状态由正则变量 q_j, p_j 来描述. 对拉氏量 $L(q(t), \dot{q}(t), t)$ 作全微分

$$\begin{aligned} \mathrm{d}L &= \sum_j \left(\frac{\partial L}{\partial q_j}\mathrm{d}q_j + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}\mathrm{d}\dot{q}_j\right) + \frac{\partial L}{\partial t}\mathrm{d}t \\ &= \sum_j (\dot{p}_j \mathrm{d}q_j + p_j \mathrm{d}\dot{q}_j) + \frac{\partial L}{\partial t}\mathrm{d}t \\ &= \sum_j (\dot{p}_j \mathrm{d}q_j - \dot{q}_j \mathrm{d}p_j) + \frac{\partial L}{\partial t}\mathrm{d}t + \mathrm{d}\sum_j (p_j \dot{q}_j), \end{aligned} \tag{7}$$

于是有

$$\mathrm{d}\left(\sum_j p_j\dot{q}_j - L\right) = \sum_j(\dot{q}_j\mathrm{d}p_j - \dot{p}_j\mathrm{d}q_j) - \frac{\partial L}{\partial t}\mathrm{d}t. \tag{8}$$

定义体系的哈密顿量 $H(q(t),p(t);t)$

$$H = H(q(t),p(t);t) \equiv \sum_j p_j\dot{q}_j - L(q,\dot{q},t). \tag{9}$$

(9) 式右端变量广义速度 $\dot{q}$ 应通过 (6) 式换成广义动量 p, 于是得到坐标 q 与动量 p 的函数: 哈密顿量 $H = H(q(t),p(t),t)$. 它的全微分为

$$\begin{aligned}\mathrm{d}H &= \sum_j(\dot{q}_j\mathrm{d}p_j - \dot{p}_j\mathrm{d}q_j) - \frac{\partial L}{\partial t}\mathrm{d}t. \\ &= \sum_j\left(\frac{\partial H}{\partial q_j}\mathrm{d}q_j + \frac{\partial H}{\partial p_j}\mathrm{d}p_j\right) + \frac{\partial H}{\partial t}\mathrm{d}t.\end{aligned} \tag{10}$$

在哈密顿力学体系中, 运动方程 (3) 式可化为

$$\frac{\partial H}{\partial p_j} = \dot{q}_j, \quad \frac{\partial H}{\partial q_j} = -\dot{p}_j, \quad \frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t}. \tag{11}$$

方程 (11) 称为哈密顿正则运动方程, 与欧拉–拉格朗日方程 (3) 式完全等价. 但需要注意的是, 在位形空间上的运动方程 (3) 式为二阶微分方程, 而在相空间上的运动方程 (11) 式则为联立的一阶微分方程组, 称为正则运动方程组.

在哈密顿力学体系中, 坐标 q 与其共轭动量 p 组成相空间上的正则变量. 任意动力学变量 $A = A(p,q)$ 都是相空间上的函数. 令 $B = B(p,q)$ 为另一动力学变量, 则在这两个动力学变量之间可以定义泊松 (Poisson) 括号 $\{,\}$

$$\{A,B\} = \sum_j\left(\frac{\partial A}{\partial q_j}\frac{\partial B}{\partial p_j} - \frac{\partial A}{\partial p_j}\frac{\partial B}{\partial q_j}\right). \tag{12}$$

由此定义可知, 泊松括号具有反对称性和双线性的性质

$$\{A,B\} = -\{B,A\},$$

$$\{\alpha A + \beta B, C\} = \alpha\{A,C\} + \beta\{B,C\},$$

且满足雅可比 (Jacobi) 恒等式

$$\{A,\{B,C\}\} + \{B,\{C,A\}\} + \{C,\{A,B\}\} = 0,$$

及莱布尼兹 (Lcibniz) 规则

$$\{A, BC\} = B\{A, C\} + \{A, B\}C.$$

泊松括号的代数性质 (泊松结构) 使得相空间成为具有泊松结构 (辛结构) 的空间.

正则变量之间的泊松括号为

$$\{q_j, q_k\} = 0, \quad \{p_j, p_k\} = 0, \quad \{q_j, p_k\} = \delta_{jk}. \tag{13}$$

任意动力学变量随时间的演化由体系的哈密顿量 $H(p,q)$ 来决定. 其对时间的全微分为

$$\begin{aligned}\dot{A} &= \sum_j \left(\frac{\partial A}{\partial q_j}\dot{q}_j + \frac{\partial A}{\partial p_j}\dot{p}_j\right) \\ &= \sum_j \left(\frac{\partial A}{\partial q_j}\frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial A}{\partial p_j}\frac{\partial H}{\partial q_j}\right) \\ &= \{A, H\}.\end{aligned} \tag{14}$$

仍以质点在外力场中的运动为例, 将体系的拉氏量 (5) 式代入 (6) 式, 得动力学体系的共轭动量

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x}, \tag{15}$$

则体系的哈密顿量 (Hamiltonian) 为

$$H = p\dot{q} - L = H(q, p, t) = \frac{p^2}{2m} + V(x), \tag{16}$$

再代入 (14) 式得正则运动方程

$$\begin{aligned}\dot{x} &= \{x, H\} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}, \\ \dot{p} &= \{p, H\} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -\frac{\partial V}{\partial x}.\end{aligned} \tag{17}$$

(17) 式即牛顿运动方程 (4) 式.

在动力学体系的相空间中, 对正则变量可以实施保持相空间泊松结构的变换, 这种变换能够保持运动方程正则形式不变, 称为正则变换. 利用正则变换可使运动方程的求解加以化简.

3. 经典力学的哈密顿–雅可比理论与哈密顿主函数

正则运动方程的解代表相空间点随时间演化, 经典力学第三种表述方案就是哈密顿–雅可比理论, 其基本思想就是相空间点随时间演化看成相空间中动点 $(q(t),$

$p(t))$ 与固定点 $(q(t_0), p(t_0))$ 之间正则变换, 此正则变换的生成函数即哈密顿主函数 $S = S(q, t; q_0, t_0)$.

在前面, 曾将作用量 S 看成是端点固定的各种可能轨道的泛函, 现在从另一角度来讨论作用量, 即讨论体系拉氏量沿实际轨道 (满足运动方程的轨道) 的积分, 那么, 作用量就变成是积分端点的函数, 称为哈密顿主函数, 记为

$$S_{cl} = S(q, t; q_0, t_0) = \int_{t_0}^{t} L(q_c(t), \dot{q}_c(t), t)\mathrm{d}t, \tag{18}$$

其中, $q_c = q_{cl}(t), \dot{q}_c = \dot{q}_{cl}(t)$ 为满足下列端点条件的运动方程 (3) 式的解:

$$q(t_0) = q_0, \quad q(t) = q. \tag{19}$$

现在来分析哈密顿主函数 S_{cl} 与其四个变量 q, t, q_0, t_0 间的关系. 当边界 (端点) 条件 (19) 式完全确定时, 体系仅有一经典轨道. 那么现在仅假定起点固定, 故有一组经典轨道, 它们在不同的时间 t 通过不同的端点位置 $q = q(t)$. 当由一条轨道转到其邻近轨道时, 作用量的变分可表示为

$$\begin{aligned} S &= \int_{t_0}^{t} \left(\frac{\partial L}{\partial q}\delta q + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\delta \dot{q} \right) \mathrm{d}t \\ &= \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\delta q \,\Big|_{t_0}^{t} + \int_{t_0}^{t} \left(\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \delta q \mathrm{d}t. \end{aligned} \tag{20}$$

由于假定 (20) 式中的积分是沿真实轨道 (在"质壳"上, 即满足运动方程的轨道) 进行的, 故 (20) 式右端第二项的贡献为零, 而对于第一项, 又因起点固定, 得

$$\delta S = p\delta q,$$

所以

$$\frac{\partial S}{\partial q} = p. \tag{21}$$

反之, 如果终点固定, 则由

$$\delta S = -p_0\delta q_0,$$

得

$$\frac{\partial S}{\partial q_0} = -p_0. \tag{22}$$

另外由 (8) 式,

$$\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial S}{\partial q}\dot{q} = \frac{\partial S}{\partial t} + p\dot{q} = L, \tag{23}$$

因此, 我们有

$$\frac{\partial S}{\partial t} = L - p\dot{q} = -H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}, t\right). \tag{24}$$

(24) 式称为哈密顿–雅可比方程.

在哈密顿–雅可比理论中, 如能找到满足上述偏微分方程 (24) 式及条件 (21) 和 (22) 式的函数 $S(q,t;q_0,t_0)$, 即可利用函数求导及代数运算解出动力学变量 $q(t),p(t)$. 在这种意义下, 正则运动方程的解就可以看成是相空间中起点 (q_0,p_0) 到终点 (q,p) 的正则变换, 而哈密顿主函数 $S(q,t;q_0,t_0)$ 作为正则变换的生成函数, 使得体系的动力学变量由初始时刻 t_0 的值 q_0 转换到以后另一时刻 t 的值 q.

当分析体系的三维运动时, (21) 式表明,

$$\boldsymbol{\nabla} S = \boldsymbol{p} ,$$

即粒子的轨道应垂直等 S 面, 所以在哈密顿–雅可比理论中可将哈密顿主函数 S 看成是粒子运动的等相位波阵面, 并可与几何光学中光子运动的波阵面相对应, 因此从哈密顿–雅可比理论可以看出在经典力学理论与光学理论之间存在着深刻的类似与联系, 而这一点在路径积分量子化理论中起着重要作用.

二、量子力学的三种表述形式

从经典力学过渡到量子力学时, 一般有三种表述形式, 即波动力学、矩阵力学和路径积分理论.

1. 波动力学形式 (薛定谔)

量子力学中的波动力学形式注重的是微观粒子的波粒二象性. 量子体系的运动状态用波函数 $\psi(x,t)$ 来描述. 动力学变量被看成是作用于波函数 $\psi(x,t)$ 上的力学量算子. 例如, 在坐标表象下, 坐标算子 $\hat{x}$ 和动量算子 $\hat{p}$ 表示为

$$\hat{x} \longmapsto x ,$$

$$\hat{p} \longmapsto -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x},$$

而体系哈密顿量算子 $\hat{H}$ 表示为

$$\hat{H} \longmapsto \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x,t).$$

在波动力学中, 体系的运动状态随时间的演化由薛定谔方程[①]决定, 即

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) &= \hat{H}(x,p)\psi(x,t)\\ &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2 + V(x,t)\right)\psi(x,t).\end{aligned} \tag{25}$$

① Schrödinger E. Ann. Phys., 1926 (79): 361, 489, 734; 1926 (80): 437; 1926 (81): 109.

当体系哈密顿量不显含时间时, 体系的力学问题可归结为求解定态薛定谔方程

$$\hat{H}(x,\hat{p})\psi_n(x,t) = E_n\psi_n(x,t).$$

对于束缚态, 上式会出现量子化的分立本征值谱, 这一事实已得到实验的证实.

2. *矩阵力学形式 (海森伯)*

量子力学中的矩阵力学强调的是物理可观测量 (动力学变量), 注重在相互共轭的可观测量之间存在的测不准关系, 并在可观测量和力学量算子之间建立起对应关系

$$\begin{array}{ccc} \text{动力学变量} & & \text{力学量算子} \\ p,q & \Longrightarrow & \hat{p},\hat{q} \end{array}$$

算子之间不可交换, 即

$$[\hat{q},\hat{p}] = \mathrm{i}\hbar.$$

矩阵力学通过将经典力学的泊松括号 $\{,\}$ 对应地过渡为量子对易括号 $[,]$ 来实现量子化, 即

$$\begin{array}{ccc} \text{经典力学} & & \text{量子力学} \\ \dfrac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t} = \{A,H\} & \Longrightarrow & \dfrac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}t} = \dfrac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{A},\hat{H}] \\ \{A(q,p),B(q,p)\} & \Longrightarrow & \dfrac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{A}(q,p),\hat{B}(q,p)] \end{array} \tag{26}$$

这种方案被称为**正则量子化**. 在选定表象后, 力学量算子用矩阵表示, 并把算子代数归结为矩阵代数 (海森伯) ①.

3. *路径积分理论 (狄拉克, 费恩曼)*

在量子力学建立初期 (1925~1927 年), 基于偏微分方程的波动力学和基于线性代数的矩阵力学就已经被提出和应用. 1942 年, 费恩曼②又提出了量子力学的第三种形式, 即路径积分理论.

路径积分理论强调, 粒子在某一时刻 t_b 的运动状态 $\psi(x_b,t_b)$ 完全由过去某一时刻 $t_a(<t_b)$ 的**所有可能**的运动状态 $\psi(x_a,t_a)$ 来决定, 即

$$\psi(x_b,t_b) = \int \mathrm{d}x_a K(x_b,t_b;x_a,t_a)\psi(x_a,t_a)\ , \tag{27}$$

① Heisenberg W Z. 1925. Phys., (33): 879.

② Feynman R P. 1948. Space time approach to non-relativistic quantum mechanics. Rev Mod Phys., (20): 367~387; The principle of least action in quantum mechanics. Princenton University, 1942.

其中, 传播函数的形式为

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \sum_{\text{所有路径}} \text{const} \cdot e^{\frac{i}{\hbar}S[x(t)]}, \tag{28}$$

而

$$S[x(t)] = \int dt L(x(t), \dot{x}(t), t) \tag{29}$$

为作用量泛函. 费恩曼路径积分理论认为: 粒子由 $(x_a,\ t_a)$ 到 $(x_b,\ t_b)$ 的各种路径都是可能的, 而每条路径 $[x(t)]$ 具有概率幅 $\backsim \text{const} \cdot e^{\frac{i}{\hbar}S[x(t)]}$. 类似于量子力学中的态叠加原理, 传播函数 $K(x_b, t_b; x_a, t_a)$ 是从 $x(t_a) = x_a$ 到 $x(t_b) = x_b$ 的所有路径 $[x(t)]$ 的概率幅的叠加, 对所有路径的求和可表达为无穷维积分 (泛函积分), 称为费恩曼路径积分.

量子力学的前两种表述形式 (采用希尔伯特空间中的算子与微分方程) 与经典力学中的哈密顿力学体系相对应, 而第三种形式, 即费恩曼路径积分理论 (采用泛函积分) 则与拉格朗日力学体系相对应. 路径积分理论的提出完善了量子力学的理论体系, 可以说, 其主要贡献源于费恩曼的工作, 但将传播函数 $K(x_b, t_b; x_a, t_a)$ 与经典拉格朗日力学形式相联系的重要思想应归于狄拉克 (Dirac).

1933 年狄拉克[①] 在 The Lagrangian in Quantum Mechanics 一文中谈到: "量子力学是建立在与经典力学的哈密顿理论类比的基础上的. 经典正则坐标和动量的形式与量子力学有着直接的、简单的类似. 于是, 建立在这种形式上的经典哈密顿理论就可以直接推广到量子情况. 现在, 讨论另一种经典动力学的形式 —— 拉格朗日力学. 拉氏量依赖于两个量 —— 坐标和速度. 拉格朗日力学与经典哈密顿理论相比显得更为基本一些. 那么就有一个问题, 经典拉格朗日力学与量子力学是如何对应的. 稍微考虑一下, 我们就知道欧拉–拉格朗日运动方程不能直接和量子理论对应. 这是因为欧拉–拉格朗日运动方程里面包含对坐标和速度的偏导数, 而它们在量子力学中的意义不明确. 在量子力学中, 对动力学变量唯一的微分过程就是泊松括号形式 (这个过程对应经典哈密顿理论). 因此, 只能用间接的方式寻求量子拉格朗日力学. 应该紧紧抓住拉格朗日力学的内涵而不是欧拉–拉格朗日运动方程."

为此, 狄拉克提出两组共轭变量 (p, q) 和 (P, Q). 在经典情况下, 生成函数的独立变量为 q 和 Q. 令 S 为所对应的生成函数, 它们的关系为

$$p = \frac{\partial S}{\partial q}, \quad P = -\frac{\partial S}{\partial Q}. \tag{30}$$

经典理论的运动方程使得动力学变量以下列方式变化: 在任意时刻 t, 动力学变量的值 q_t, p_t 与另一时刻 T 的值 q_T, p_T 之间是通过一个变换 (30) 紧密联系的. 令

① Dirac P. 1933. Zeitschr Sowjctunion Phys., (3): 64~72.

$q = q_t, p = p_t$；$Q = q_T, P = p_T$, S 等于拉氏量对时间从 T 到 t 的积分. 则在量子理论中, q_t, p_t 与 q_T, p_T 也可以通过一个变换 $(q_t \mid q_T)$ 联系起来, 其中

$$(q_t|q_T) \quad \text{对应于} \quad \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_T^t \mathrm{d}t\mathcal{L}\right\},$$

这里 $\mathcal{L}$ 是拉氏量. 如果取从 T 到 t 为无穷小, 则

$$(q_{t+\mathrm{d}t}|q_t) \quad \text{对应于} \quad \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathrm{d}t\mathcal{L}\right\}.$$

后来, 费恩曼提出了路径积分理论, 用了比薛定谔波动方程和海森伯矩阵力学更为复杂的泛函积分方法, 并用无穷维路径系综 (ensemble of path) 描述体系的量子化行为. 现在看来, 路径积分理论是连接经典物理与量子物理的桥梁, 可以更形象更直观地分析量子力学与经典力学的联系. 路径积分理论能够体现物理体系的整体 (global) 性质和时空流形的整体拓扑.

此外, 路径积分把含时间问题和不含时间问题置于同一理论框架中处理. 作用量 $S[x(t)]$ 是相对论不变量, 易于从非相对论推广到相对论洛伦兹 (Lorentz) 协变形式, 因此现代量子场论都以路径积分为出发点, 特别是, 较难处理的规范理论量子化问题用路径积分量子化最为方便.

路径积分理论可对时间作解析延拓, 分析统计问题, 体现了量子动力学与统计物理的深刻联系, 目前已成为现代量子统计的基础理论.

凝聚态物理中, 凝聚态中各种元激发, 例如, 固体中的声子、能带中的电子与空穴 …… 采用量子场论方法, 亦即采用路径积分理论进行分析.

路径积分理论对于具有曲率、挠率空间中的动力学问题, 以及对于超弦理论、引力场论的量子化等问题也十分有效, 在某种意义上讲, 路径积分也是量子引力理论的基础.

采用路径积分形式处理量子力学问题时, 算子不见了, 这就为描述量子涨落提供了方便, 路径积分理论已在现代量子混沌学的研究中显示出重要作用.

氢原子问题具有精确解, 曾是量子力学中最重要的问题之一, 也是检验量子力学是否正确的试金石, 但是用路径积分方法来分析氢原子能谱却非常困难. 直到 1979 年 Duru 与 Kleinert ① 采用了天体物理中的一种时空变换 (Kustaanheimo-Stiefel 变换), 成功地将路径积分理论应用到库仑问题中. 这种时空变换思想为解决很多原来未解决的非相对论量子力学的路径积分问题打开了新的思路, 促使了路径积分量子化理论及其应用在近二十多年来的迅猛发展. 盖尔曼 (Gell-Mann) 曾这样评价: "量子力学路径积分形式比一些传统形式更为基本, 因为在许多领域它都能应用, 而其他传统表述形式将不再适用." ②

① Duru I H, Kleinert H. 1979. Phys. Lett., (84B): 185.
② Gell-Mann M. 1989. Phys. Today, (43): 50.

第 1 章　量子力学及其路径积分表述

1.1　量子力学若干基本概念回顾

本节先简单介绍大家熟悉的量子力学基本原理和量子力学的一些主要公式, 并从量子力学的基本表述出发, 得到量子力学路径积分表述.

狄拉克在《量子力学原理》一书中曾对量子力学基本原理作了深入分析, 这里仅作简单回顾.

态叠加原理　物理体系的状态都是复希尔伯特 (Hilbert) 空间 (态矢空间) 中的非零矢量, 称为态矢量 (或态矢). 态矢量的线性叠加也是一个可能的态矢量. 决定态矢量的物理方程一般都是线性的. 两态矢量如果仅差非零复因子, 则描述相同的物理状态.

力学量测量原理　力学量是作用于希尔伯特空间上的厄米算子, 其本征值谱是对该力学量测量所可能取的数值, 本征态矢的集合在希尔伯特空间中是完备的.

对应原理　量子力学各力学量往往都有经典对应. 量子力学中的一些规则 (如算子对易关系), 往往都是经典力学中相应规则 (如泊松括号) 的对应推广.

动力学原理　与经典哈密顿量对应的哈密顿算子, 决定着体系的动力学性质.

在非相对论力学中, 坐标与动量是相互共轭的动力学变量, 而时间与哈密顿量却占有特殊的地位, 即时间 t 为参变量, 体系动力学性质 $F(q,p)$ 随时间的变化由哈密顿量决定：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}F(q,p) \equiv \{F(q,p), H(q,p)\}. \tag{1.1}$$

全同性原理　对于全同粒子体系, 对全体粒子变量置换为对称的或反对称的态矢才能真正代表体系的状态.

对于这里所牵涉到许多基本概念, 如希尔伯特空间、态矢量、厄米算子、本征值、本征态、本征态的完备集等. 狄拉克设计了一套符号, 如右矢 $|A\rangle$、左矢 $\langle A|$、标积 $\langle A|B\rangle$、算子 $|A\rangle\langle B|$、……

利用狄拉克符号分析量子力学问题特别有效. 为此先以有限维矢量空间为例介绍与使用狄拉克符号, 以便能够很好地熟悉、掌握和运用它们, 然后再逐步用于分析量子力学问题. 由于与量子力学相关的物理及数学的概念非常广泛, 所以这里仅作简单的介绍.

1.1.1 态矢及算子的狄拉克符号表述

矢量空间(线性空间) 设 V 为复数域上的 n 维矢量空间, 其成员矢量用右矢 $|\rangle$ 表示, 为标明某一特殊矢量, 可在 $|\rangle$ 中标上某种符号, 如 $|A\rangle \in V$.

矢量集合 $\{|A\rangle\}$ 内存在加法运算, 满足阿贝尔群规则

$$|A\rangle + |B\rangle = |B\rangle + |A\rangle.$$

矢量可与复数相乘, 满足结合律及分配律, 即

$$\begin{aligned}&\mu(\lambda|A\rangle) = (\mu\lambda)|A\rangle, \quad \mu,\lambda \in \mathbb{C}\\&\lambda(|A\rangle + |B\rangle) = \lambda|A\rangle + \lambda|B\rangle.\end{aligned}$$

矢量空间中各矢量是否线性相关是一重要概念. 当说 m 个矢量 $|A_1\rangle, |A_2\rangle, \cdots, |A_m\rangle$ 线性独立, 即其中任一个矢量都不能表示成其他矢量的线性组合, 亦即它们之间有性质, 如存在等式

$$\sum_{i=1}^{m} \alpha^i |A_i\rangle = 0, \quad \alpha^i \in \mathbb{C}$$

则必导致所有系数 $\alpha^i = 0$, 否则称为线性相关.

矢量空间中线性独立矢量的最大数目 n 称为矢量空间的维数. 在 n 维矢量空间中, 可选 n 个基底矢量 $\{|A_i\rangle\}_1^n$, 矢量空间中任意矢量 $|\psi\rangle$ 均可表示为基矢的线性和, 即

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{n} \alpha^i |A_i\rangle.$$

伴随空间 矢量空间 V 上的线性函数, 用左矢 $\langle|$ 表示, 如 $\langle\phi| \in \hom(V,\mathbb{C})$

$$\begin{aligned}\langle\phi| : V &\to \mathbb{C},\\ |A\rangle &\to \langle\phi|A\rangle \in \mathbb{C},\end{aligned}$$

具有性质

$$\langle\phi|(\lambda|A\rangle + \mu|B\rangle) = \lambda\langle\phi|A\rangle + \mu\langle\phi|B\rangle,$$

即它保持矢量空间线性结构, $\langle\phi| \in \hom(V,\mathbb{C})$.

矢量空间上线性函数集合 $\{\langle\phi|\}$, 易证: 线性函数之和仍为线性函数, 线性函数与复数之积仍为线性函数. 矢量空间 V 上所有线性函数的集合构成复数域上矢量空间 V^*, 称为左矢空间, 它是原来矢量空间 V 的伴随空间, 即

$$\langle\phi| \in V^*, \quad V^* = \hom(V,\mathbb{C}).$$

可以证明有限维矢量空间 V 与 V^* 具有相同维数, 是相互同构的矢量空间, 即

$$V^* = \hom(V, \mathbb{C}), \quad V^{**} = \hom(V^*, \mathbb{C}) \approx V. \tag{1.2}$$

对于无穷维矢量空间, (1.2) 式最后一式应为 $V^{**} \supset V$. 在矢量空间 V 与 V^* 之间可定义标积: 任意左矢 $\langle\phi| \in V^*$ 是 $V = \{|A\rangle\}$ 上线性函数, 即它可与任一右矢 $|A\rangle \in V$ 间存在标积

$$\langle\phi|A\rangle \in \mathbb{C}.$$

对偶映射与度规的引入　假定在右矢空间 V 与左矢空间 V^* 之间存在其成员间一一对应的映射 l, 称为对偶映射, 满足

$$\begin{aligned} &l: V \to V^*, \\ &|A\rangle \to \overline{|A\rangle} \equiv \langle A| \in V^*, \end{aligned}$$

即对任意右矢 $|A\rangle \in V$, 必存在特定左矢 (记为 $\langle A|$) 与 $|A\rangle$ 对偶对应. 对偶映射具有如下性质:

$$\begin{aligned} \overline{(|A\rangle + |B\rangle)} &= \langle A| + \langle B|, \\ \overline{\lambda|A\rangle} &= \lambda^*\langle A|, \end{aligned}$$

即对偶映射保持矢量空间斜线性结构.

到目前为止在矢量空间 V 内部还未定义度规, 即未定义矢量空间内部任意两矢量之间的内积. 当在两相互对偶的矢量空间的成员间选定一一对应的对偶映射, 便可利用这种对应关系建立右矢空间 $V = \{|\rangle\}$(左矢空间 V^* 也类似) 的度规: 具体做法是, 当在 V 与 V^* 之间建立一一对应的映射 l, 则可在矢量空间 V 内任意两个矢量 $|A\rangle$ 与 $|B\rangle$ 定义它们之间的内积, 使 V 成为具有内积运算的度量空间. 例如, 将其中之一作对偶映射 $|B\rangle \to \overline{|B\rangle} \equiv \langle B|$ 之后再将它与 $|A\rangle$ 作标积, 得 $\langle B|A\rangle \in \mathbb{C}$, 称为右矢 $|A\rangle$ 在右矢 $|B\rangle$ 上的投影. 类似地还可以讨论右矢 $|B\rangle$ 在右矢 $|A\rangle$ 上的投影, 即 $\langle A|B\rangle \in \mathbb{C}$. 易证

$$\langle B|A\rangle = \overline{\langle A|B\rangle} = (\langle A|B\rangle)^*.$$

因此, 上式中如果令 $|B\rangle = |A\rangle$, 则 $\langle A|A\rangle$ 必为实数. 如果进一步假定除 $|A\rangle = 0$ 外, 有

$$\langle A|A\rangle > 0, \tag{1.3}$$

则称正实数 $\langle A|A\rangle$ 的平方根

$$(\langle A|A\rangle)^{\frac{1}{2}} \equiv ||A\rangle|$$

为矢量 $|A\rangle$ 的范数, 且有如下施瓦兹 (Schwartz) 不等式成立:

$$|\langle A|B\rangle|^2 \leqslant \langle A|A\rangle\langle B|B\rangle. \tag{1.4}$$

具有这样性质的矢量空间 V(左矢空间 V^* 类似) 称为正定厄米度量空间. 由上面分析可知, 当在 V 与 V^* 两矢量空间成员间具有一一对应的对偶映射, 则 V 与 V^* 均为具有厄米度量的矢量空间. 反之, 当矢量空间 V 上定义有正定的厄米度量时, V 称为厄米空间, 这时在 V 与 V^* 成员之间一定存在有一一对应的对偶映射.

线性算子 作用于矢量空间 V 上的线性算子 $\hat{L}$, 将使 V 中任意矢量 $|A\rangle$ 映射到 V 中另一个矢量上, 即

$$\begin{aligned}\hat{L}: V &\to V,\\ |A\rangle &\to \hat{L}|A\rangle \in V,\end{aligned}$$

且具有性质

$$\begin{aligned}\hat{L}(|A\rangle + |B\rangle) &= \hat{L}|A\rangle + \hat{L}|B\rangle,\\ \hat{L}(\lambda|A\rangle) &= \lambda\hat{L}|A\rangle,\end{aligned}$$

即 $\hat{L}$ 为保持矢量空间结构的线性算子, $\hat{L} \in \mathrm{hom}(V, V)$.

作用于矢量空间 V 上的线性算子集合记为 $\{\hat{L}\}$. 利用矢量空间的线性结构, 可定义线性算子间的各种运算. 例如, 利用矢量间的加法运算可定义算子间的加法运算

$$\hat{L}_1|A\rangle + \hat{L}_2|A\rangle = (\hat{L}_1 + \hat{L}_2)|A\rangle;$$

利用矢量与数乘运算可定义算子与数乘运算

$$\hat{L}(\alpha|A\rangle) = (\alpha\hat{L})|A\rangle.$$

于是线性算子集合本身也组成线性空间. 进一步, 利用算子对矢量的作用还可定义线性算子间的乘法运算

$$\hat{L}_1(\hat{L}_2|A\rangle) = (\hat{L}_1\hat{L}_2)|A\rangle.$$

显然按上式定义的乘法运算满足结合律, 即

$$\hat{L}_1(\hat{L}_2\hat{L}_3) = (\hat{L}_1\hat{L}_2)\hat{L}_3,$$

且在算子的乘法与加法之间满足分配律

$$\hat{L}_1(\hat{L}_2 + \hat{L}_3) = \hat{L}_1\hat{L}_2 + \hat{L}_1\hat{L}_3.$$

但是, 算子之间一般并不相互对易, 即

$$\hat{L}_1\hat{L}_2 \neq \hat{L}_2\hat{L}_1.$$

因此矢量空间上所有线性算子集合组成线性代数, 但算子代数是不可对易线性代数.

正交基矢　假定线性空间 V 上定义有正定的厄米度量, 则 V 为厄米空间. V 中两矢量 $|A\rangle$ 与 $|B\rangle$, 如果其内积为零, 即

$$\langle A|B\rangle = 0,$$

则称此两矢量相互正交.

在 n 维线性空间中可选取 n 个线性独立的矢量, 记为 $\{|A_i\rangle, i=1,\cdots,n\}$, V 中任意矢量 $|\psi\rangle$ 可用它们展开

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{n} c_i|A_i\rangle, \quad c_i \in \mathbb{C}. \tag{1.5}$$

对于厄米矢量空间, 从任意一组线性独立的 n 个矢量 $\{|A_i\rangle\}$ 出发, 可通过重新线性组合得到 n 个正交归一的矢量, 记为 $\{|e_i\rangle, i=1,\cdots,n\}$, 满足

$$\langle e_i|e_j\rangle = \delta_{ij}. \tag{1.6}$$

例如, 可通过如下施密特 (Schmidt) 正交化过程来实现:

选 $|e_1\rangle$ 满足

$$\lambda_1|e_1\rangle = |A_1\rangle, \quad |\lambda_1|^2 = \langle A_1|A_1\rangle.$$

选 $|e_2\rangle$ 满足

$$\lambda_2|e_2\rangle = |A_2\rangle - \hat{p}_1|A_2\rangle, \tag{1.7}$$

其中, 线性算子 $\hat{p}_1 \equiv |e_1\rangle\langle e_1|$ 称为投影算子, 它是等幂算子, 即

$$\hat{p}_1^2 = |e_1\rangle\langle e_1|e_1\rangle\langle e_1| = |e_1\rangle\langle e_1| = \hat{p}_1.$$

在它的作用下, 任意矢量 $|\psi\rangle$ 被作用后将沿 $|e_1\rangle$ 方向, 即

$$\hat{p}_1|\psi\rangle = |e_1\rangle\langle e_1|\psi\rangle = \langle e_1|\psi\rangle|e_1\rangle.$$

因为 $|A_2\rangle$ 与 $|A_1\rangle$ 线性独立, 所以 (1.7) 式右端非零, 且为与 $|e_1\rangle$ 正交的非零矢量, 再选归一化因子 λ_2 使所得 $|e_2\rangle$ 归一.

类似地, 可选 $|e_3\rangle$ 满足

$$\lambda_3|e_3\rangle = |A_3\rangle - \hat{p}_1|A_3\rangle - \hat{p}_2|A_3\rangle,$$

$\hat{p}_2 \equiv |e_2\rangle\langle e_2|$ 为将矢量投射到 $|e_2\rangle$ 的投影算子. 易证上式右端非零, 且为与 $|e_1\rangle$、$|e_2\rangle$ 正交的非零矢量, 再选归一化因子 λ_3, 使所得 $|e_3\rangle$ 归一. 以此类推, 可得到 n 个正交归一的矢量 $\{|e_i\rangle, i = 1, \cdots, n\}$, 它们满足 (1.6) 式.

矩阵表示　在 n 维厄米空间 V 中选定 n 个正交归一的矢量 $\{|e_i\rangle, i = 1, \cdots, n\}$, 称为正交归一完备基矢组 (或称完备集), V 中任意矢量 $|\psi\rangle$ 均可由它们的线性组合来表示, 即

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{n} c_i|e_i\rangle, \quad c_i = \langle e_i|\psi\rangle \in \mathbb{C}. \tag{1.8}$$

因为

$$\langle\psi|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{n} c_i^* c_i = \sum_{i=1}^{n}\langle\psi|e_i\rangle\langle e_i|\psi\rangle = \langle\psi|\sum_{i=1}^{n}|e_i\rangle\langle e_i|\psi\rangle, \tag{1.9}$$

此式对 V 中任意矢量均成立, 所以有完备性条件

$$\sum_{i=1}^{n}|e_i\rangle\langle e_i| = \sum_{i=1}^{n}\hat{p}_i = I. \tag{1.10}$$

当基矢组选定后, 任意线性算子 $\hat{L}$ 也可用它对基矢的作用来表示. 例如, 将 $\hat{L}|e_j\rangle$ 这个右矢按基矢组展开

$$\hat{L}|e_i\rangle = \sum_{j=1}^{n} L_{ji}|e_j\rangle,$$

其中, 系数

$$L_{ji} = \langle e_j|\hat{L}|e_i\rangle.$$

这样算子 $\hat{L}$ 也可写为

$$\hat{L} = \sum_{i,j=1}^{n} |e_i\rangle L_{ij}\langle e_j|, \tag{1.11}$$

即线性算子可用方阵 (L_{ij}) 表示, 称为算子的谱表示. 因此, 线性算子间的代数运算, 与其表示矩阵的代数运算相对应. 需要注意的是, 表示矩阵的具体表达式依赖于基矢组的选取, 而算子则是确定的几何对象, 与基矢组的选取无关.

厄米共轭变换　线性算子集合本身也是线性空间. 可定义作用于算子空间上的厄米共轭变换, 它正是前面态矢间对偶变换的推广. 由算子 $\hat{L}$ 对任意右矢 $|\psi\rangle$ 的作用, 得右矢

$$|\phi\rangle = \hat{L}|\psi\rangle,$$

对上式两边作对偶变换

$$\langle\phi| = \overline{\hat{L}|\psi\rangle} = \langle\psi|\hat{L}^\dagger,$$

借助上面方案可对任意线性算子 $\hat{L}$ 定义厄米共轭变换

$$\dagger : \hat{L} \to \hat{L}^\dagger$$

具有性质

$$(\hat{L}_1\hat{L}_2)^\dagger = \hat{L}_2^\dagger\hat{L}_1^\dagger. \tag{1.12}$$

易证 $\hat{L}^\dagger$ 的矩阵表示相当于 $\hat{L}$ 的矩阵表示 (L_{ij}) 的转置复共轭

$$L_{ij}^\dagger = L_{ji}^*. \tag{1.13}$$

作用在整个矢量空间上的线性变换 $\hat{U}$, 如果这种变换是一一对应的, 这种线性变换算子称为非奇异算子, 此时可讨论其逆算子

$$|\phi\rangle = \hat{U}|\psi\rangle,$$

$$\hat{U}^{-1}|\phi\rangle = |\psi\rangle.$$

当采用一定表象 (选定正交归一完备基矢组), 逆算子可用原算子的表示矩阵的逆矩阵表示, 而逆矩阵存在的条件, 即表示矩阵行列式不为零, 也是相应算子为非奇异算子的条件.

当逆算子存在, 容易证明它们满足

$$\begin{aligned} \hat{U}^{-1}\hat{U} &= \hat{U}\hat{U}^{-1} = I, \\ (\hat{U}\hat{V})^{-1} &= \hat{V}^{-1}\hat{U}^{-1}. \end{aligned} \tag{1.14}$$

在量子力学中, 有两类线性算子最为重要:

(1) 厄米算子

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A}. \tag{1.15}$$

力学量算子, 如动量算子 $\hat{p}$, 坐标算子 $\hat{x}$, 哈密顿算子 $\hat{H},\cdots$ 都是作用于态矢空间 (有厄米度量的线性空间) 上的厄米算子;

(2) 幺正算子

$$\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}. \tag{1.16}$$

表象变换算子都是幺正算子, 时间演化算子也是幺正算子.

表象及表象变换　在 n 维厄米空间 V 中选定 n 个正交归一的基矢组 $\{|i\rangle, i = 1,\cdots,n\}$, 满足

$$\begin{aligned} &\langle i|j\rangle = \delta_{ij} \quad (\text{正交归一条件}) \\ &\sum_i |i\rangle\langle i| = I \quad (\text{完备性条件}) \end{aligned} \tag{1.17}$$

V 中任意矢量 $|\psi\rangle$ 均可由它们的线性组合表示为

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{n} c_i |i\rangle, \quad c_i = \langle i|\psi\rangle \in \mathbb{C}, \tag{1.18}$$

而任意线性算子 $\hat{A}$ 也可表示为

$$\hat{A} = \sum_{ij} |i\rangle A_{ij} \langle j|, \quad A_{ij} = \langle i|\hat{A}|j\rangle \in \mathbb{C}, \tag{1.19}$$

因此态矢空间基矢组选定后, 线性算子及态矢量都可表示为矩阵形式, 称为矩阵表示:

$$\hat{A} = (A_{ij}), \quad |\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}, \quad \langle\psi| = (c_1^*, c_2^*, \cdots, c_n^*). \tag{1.20}$$

线性算子的代数运算, 便与其表示矩阵的运算相对应.

如另选一组正交归一基矢组 $\{|i'\rangle\}$ 作为基底, 就相当于选了另一种矩阵表示, 这时算子及态矢的矩阵表示都要做相应的改变, 称为表象变换.

整个矢量空间上的表象变换是幺正变换. 因为, 假定在表象变换 $\hat{U}$ 作用下原来的基矢组 $\{|i\rangle\}$ 变换成 $\{|i'\rangle\}$, 且

$$\begin{aligned} |i'\rangle = \hat{U}|i\rangle &= \sum_j |j\rangle\langle j|\hat{U}|i\rangle \\ &= \sum_j |j\rangle U_{ji}, \quad U_{ji} = \langle j|\hat{U}|i\rangle \end{aligned}$$

由于原来基矢组 $\{|i\rangle\}$ 满足正交归一和完备性条件, 如果要求新基矢组 $\{|i'\rangle\}$ 也满足正交归一和完备性条件, 则可证明算子 $\hat{U}$ 应是幺正算子, 其对应矩阵 (U_{ji}) 是幺正矩阵.

事实上, 若要求变换后的新基矢组 $|i'\rangle = \hat{U}|i\rangle$ 满足正交归一条件

$$\langle j'|i'\rangle = \langle j|\hat{U}^\dagger\hat{U}|i\rangle = \delta_{ji} = \langle j|i\rangle,$$

即

$$\hat{U}^\dagger\hat{U} = I.$$

其次, 再要求其满足完备性条件

$$\sum_{i'} |i'\rangle\langle i'| = \sum_i \hat{U}|i\rangle\langle i|\hat{U}^\dagger = \hat{U}\hat{U}^\dagger = I,$$

于是

$$\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^\dagger = I,$$

或

$$\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}.$$

在表象变换下, 态矢量 $|\psi\rangle$ 和各力学量对应算子 $\hat{A}$ 按如下规律变换:

$$|\psi'\rangle = \hat{U}|\psi\rangle, \quad \hat{A}' = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^{-1} = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger. \tag{1.21}$$

表象变换不改变算子的代数结构, 不改变算子所满足的方程.

本征值问题　厄米算子 (力学量算子) 的本征值与本征态具有一些特殊的性质. 对于某特定线性算子 $\hat{A}$, 在态矢空间常存在这样的态矢 $|\alpha\rangle$, 满足

$$\hat{A}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle, \tag{1.22}$$

即算子 $\hat{A}$ 对态矢 $|\alpha\rangle$ 的作用, 相当于一个数 α 与态矢 $|\alpha\rangle$ 相乘, 或者说, 算子 $\hat{A}$ 的作用不改变态矢 $|\alpha\rangle$ 的方向, 这时态矢 $|\alpha\rangle$ 称为算子 $\hat{A}$ 的本征值为 α 的本征态矢 (或本征态).

下面通过介绍几个定理来着重介绍厄米算子 $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ 的本征值与本征态矢的特点:

定理 1　厄米算子的本征值必为实数.

证明: 因为 $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$, 首先将 (1.22) 式两端左乘 $\langle\alpha|$ 得

$$\langle\alpha|\hat{A}|\alpha\rangle = \alpha\langle\alpha|\alpha\rangle, \tag{1.23}$$

其次将 (1.22) 式两边作厄米共轭运算得

$$\langle\alpha|\hat{A} = \langle\alpha|\alpha^*,$$

再对上式两端右乘 $|\alpha\rangle$ 后与 (1.23) 式相减得

$$(\alpha - \alpha^*)\langle\alpha|\alpha\rangle = 0.$$

由于厄米空间具有恒正厄米度量, 即 $\langle\alpha|\alpha\rangle > 0$. 因此有

$$\alpha = \alpha^*,$$

即厄米算子的本征值必为实数.

定理 2　厄米算子属于不同本征值的本征态矢相互正交.

证明: 设 $|\alpha\rangle$、$|\beta\rangle$ 为厄米算子 $\hat{A}$ 的分别属于本征值为 α、β 的本征态矢. 将 $\hat{A}|\beta\rangle = \beta|\beta\rangle$ 作厄米共轭变换, 并利用定理 1 得

$$\langle\beta|\hat{A} = \langle\beta|\beta,$$

上式右乘 $|\alpha\rangle$ 后与 (1.22) 式左乘 $\langle\beta|$ 相减得

$$(\alpha-\beta)\langle\beta|\alpha\rangle = 0,$$

由于 $\alpha \neq \beta$, 因此 $\langle\beta|\alpha\rangle = 0$.

定理 3 非奇异厄米算子的本征态矢可组成完备集.

证明: 在态矢量空间选取一定表象, 则算子的本征值方程变成 n 维厄米矩阵的本征值问题. 由矩阵代数知, 厄米矩阵可通过幺正矩阵变换成为对角矩阵, 即

$$\hat{A}' = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^{-1} = \mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \cdots).$$

非奇异厄米算子有 n 个非零实本征值, 分别对应于 n 个相互线性独立的本征态矢. 由定理 2 知, 厄米算子不同本征值的本征态矢间相互正交. 对于本征值简并的本征态矢, 可采用施密特正交化, 将简并本征态矢重新线性组合成相互正交的本征态矢, 于是得到 n 个相互正交的本征态矢, 它们组成完备集.

定理 4 如果两个厄米算子相互对易, 则它们有共同的本征态矢, 且它们的共同本征态矢能组成完备集. 反之亦然, 即如果两个厄米算子的共同本征态矢能组成完备集, 则它们必可对易.

于是当厄米算子 $\hat{A}$ 的本征值为 λ 的本征态矢简并时, 可寻找与 $\hat{A}$ 对易的厄米算子 $\hat{B}$, 它们有共同的本征态矢 $|\lambda,\mu\rangle$, μ 为 $\hat{B}$ 的本征值. 这样可将简并本征态矢进一步分类, 使它们相互正交 (不需采用施密特正交化过程). 如果还不能完全消除简并, 则可进一步寻找与 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 都对易的厄米算子 $\hat{C}$, 构造它们的共同本征态矢. 如此类推, 最后找到相互对易的厄米算子集合, 它们的 n 个本征态矢没有两个有完全相同的本征值 (不简并), 组成相互正交完备集, 而这组相互对易的厄米算子集合称为力学量的完全集.

1.1.2 量子力学体系的三种表象

以上用狄拉克符号来表达有限维矢量空间中态矢与算子的代数结构. 而量子力学体系中描写物理体系状态的态矢空间 —— 希尔伯特空间是具有厄米度规的无穷维的完备空间. 希尔伯特空间是上述有限维矢量空间的推广. 当线性空间维数 $n \to \infty$ 时, 会出现一些新的特点. 例如, 对于无限维矢量空间 V, 其伴随空间 V^* 是具有更高维数的线性空间. 因此 (1.2) 式不再适合, 即

$$V^{**} = \mathrm{hom}(V^*, \mathbb{C}) \neq V,$$

n 维矢量空间的 n 个线性独立的矢量组必完备. 而对于无穷维矢量空间, 其完备性问题需要分析.

无穷维态矢空间的完备性　前面曾假定态矢量空间是有限维 (n 维) 的, 当空间维数 n 增加到无穷时, 就会产生无穷级数的收敛性问题. 对于 n 维矢量空间, n 个相互正交矢量集合自动完备, 空间中任一矢量都可用它展开. 而对于 $n \to \infty$ 时的无穷维矢量空间, 其完备性条件需要重新定义.

在态矢空间, 如果任一态矢 $|\psi\rangle$ 都可用线性独立右矢序列 $\{|A_i\rangle\}$ 的线性组合 $\sum\limits_{i=1}^{n} c_i|A_i\rangle$ 逼近, 使其误差的模任意小 (满足 ϵ-N 条件), 即

$$\left||\psi\rangle - \sum_{i=1}^{n} c_i|A_i\rangle\right| < \epsilon, \quad 当 \quad n > N(\epsilon),$$

则称态矢序列 $\{|A_i\rangle\}$ 为完备序列.

对完备态矢序列, 可用施密特正交化过程逐一正交化, 形成正交归一的完备序列 $\{|i\rangle\}$, 满足

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij}, \quad i,j = 1,2,\cdots,\infty, \tag{1.24}$$

因此, 可得态矢 $|\psi\rangle$ 的最佳逼近的线性组合

$$\sum_{i=1}^{n} \lambda_i|i\rangle, \quad \lambda_i = \langle i|\psi\rangle,$$

其中, 系数 $\{\lambda_i\}$ 满足贝塞尔 (Bessel) 不等式, 即

$$\sum_{i=1}^{n} |\lambda_i|^2 \leqslant \langle\psi|\psi\rangle, \quad 当 \quad n > N(\epsilon). \tag{1.25}$$

可以证明, 只要最佳逼近式满足

$$\left||\psi\rangle - \sum_{i=1}^{n} \lambda_i|i\rangle\right| < \epsilon, \quad 当 \quad n > N(\epsilon), \tag{1.26}$$

则称 $\sum\limits_{i=1}^{\infty} \lambda_i|i\rangle$ 平均收敛于 $|\psi\rangle$, 记为

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i|i\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} |i\rangle\langle i|\psi\rangle.$$

由于上式对任意态矢均适合, 故无穷维态矢空间的完备性条件可写为

$$\sum_{i=1}^{\infty} |i\rangle\langle i| = I. \tag{1.27}$$

(1.24) 与 (1.27) 式是无穷维希尔伯特空间正交归一完备基 $\{|i\rangle\}$ 所必需满足的两个条件.

以上曾假定基矢指标为离散谱, 当基矢指标为连续谱时, 应将相应求和化为积分, 将离散的 δ_{ij} 符号化为相应的 δ 函数.

在量子力学中, 描写物理体系运动状态的是态矢空间中的非零态矢量. 为简单起见, 先分析单粒子一维运动, 其力学量完全集仅需一个力学量: 坐标 $\hat{x}$, 或者动量 $\hat{p}$, 或者哈密顿量 $\hat{H}$. 本征态矢集合在态矢空间完备, 即态矢空间的任一态矢 $|\psi\rangle$ 都可用它们展开. 这里将介绍通常情况下常用的三种表象 (representation).

1. **坐标表象**

以坐标算子 $\hat{x}$ 的本征态矢组 $\{|x\rangle\}$ 作为完备基, 满足正交归一和完备性条件

$$\langle x|\, x'\rangle = \delta(x - x'),$$
$$\int \mathrm{d}x\, |x\rangle\, \langle x| = I. \tag{1.28}$$

任意态矢 $|\psi(t)\rangle$ 可用坐标基矢展开为

$$|\psi(t)\rangle = I\,|\psi(t)\rangle = \int \mathrm{d}x|x\rangle\langle x|\psi(t)\rangle = \int \mathrm{d}x|x\rangle\psi(x,t),$$

其中, 函数 $\psi(x,t) = \langle x|\psi(t)\rangle$ 是态矢 $|\psi(t)\rangle$ 在坐标表象中的展开系数, 称为坐标表象波函数. 波函数 $\psi(x,t)$ 代表体系在坐标空间的概率密度振幅, $|\psi(x,t)|^2$ 代表粒子在坐标空间的概率密度分布.

2. **动量表象**

类似地, 也可取动量算子的本征态矢组 $\{|p\rangle\}$ 作为完备基, 满足正交归一和完备性条件, 即

$$\langle p|\, p'\rangle = \delta(p - p'),$$
$$\int \mathrm{d}p\, |p\rangle\, \langle p| = I. \tag{1.29}$$

而坐标基矢 $|x\rangle$ 与动量基矢 $|p\rangle$ 间的标积给出两种表象间表象变换的矩阵元

$$\langle x|\, p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px} = [\langle p|\, x\rangle]^*, \tag{1.30}$$

即

$$\psi(x,t) = \langle x|\, \psi(t)\rangle = \int \mathrm{d}p\, \langle x|\, p\rangle\, \langle p|\, \psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int \mathrm{d}p\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\phi(p,t), \tag{1.31}$$

其中, 函数 $\phi(p,t) \equiv \langle p|\, \psi(t)\rangle$ 是体系运动状态在动量表象中的波函数, $|\phi(p,t)|^2$ 代表粒子在动量空间的概率密度分布.

3. 能量表象

同样, 还可取哈密顿算子的本征态矢组 $\{|n\rangle\}$ 作为完备基 (这里暂定体系能谱取分立值), 其满足正交归一和完备性条件, 即

$$\begin{aligned} \langle n|\, m\rangle &= \delta_{nm}, \\ \sum_n |n\rangle \langle n| &= I. \end{aligned} \tag{1.32}$$

波函数为

$$\psi(x,t) = \langle x|\psi(t)\rangle = \sum_n \langle x|n\rangle\langle n|\psi(t)\rangle \equiv \sum_n \psi_n(x) C_n(t),$$

$|C_n(t)|^2$ 代表体系的能量概率分布. 若集合 $\{C_n(t)\}$ 已知, 体系的运动状态也就可知了. 可将 $\{C_n(t)\}$ 排成列矩阵 $(C_n(t))$, 用它描写微观粒子的运动状态. 实际上, $\psi(x,t)$, $\phi(p,t)$, $C_n(t)$ 是微观粒子同一运动状态的三种不同表达方式, 称为态矢量 (波函数) 在不同表象中的表示.

1.1.3　描写量子力学体系动力学规律的三种绘景

量子系统随时间演化的表达方式称为绘景 (picture). 由于状态随时间的演化包括态矢量和力学量两个方面, 所以有可能采用多种表达方式. 例如, 可将状态随时间的演化归因于态矢量的改变, 也可归因于力学量的改变, 或者将状态随时间的改变部分地归因于态矢量, 部分地归因于力学量. 与上述三种方式相对应, 通常有三种绘景, 即薛定谔绘景、海森伯绘景和相互作用绘景. 这里只介绍前两种, 相互作用绘景在微扰量子场论中常用, 将在第 4 章介绍微扰问题时再对相互作用绘景作简单介绍.

量子力学中讨论的抽象态矢 $|\psi\rangle$(希尔伯特空间中态矢) 与算子 $\hat{O}$(作用于希尔伯特空间上的算子) 都不是可直接测量的物理量, 可进行观察的是力学量的平均值 $\langle\psi|\,\hat{O}\,|\psi\rangle$、力学量在态矢间矩阵元 $\langle\phi|\,\hat{O}\,|\psi\rangle$、态矢在不同表象的波函数 $\langle x|\,\psi(t)\rangle = \psi(x,t)$ 的平方等. 虽然哈密顿量 $\hat{H}$ 决定着这些矩阵元随时间的演化, 但是在形式上将其随时间演化的关系归因于矩阵元中的不同因子而不会影响观测结果. 在分析动力学规律时常常选择不同绘景, 将时间演化归因于矩阵元中不同因子, 而使问题的讨论得以简化.

例如, 对于可测的力学量平均值随时间的演化, 薛定谔绘景将它随时间的演化完全归因于态矢量, 即

$$(\langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle)(t) \equiv_S \langle\psi(t)|\hat{O}_S|\psi(t)\rangle_S,$$

而海森伯绘景则将它完全归因于力学量算子, 即

$$(\langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle)(t) \equiv_H \langle\psi|\hat{O}_H(t)|\psi\rangle_H =_S \langle\psi(t)|\hat{O}_S|\psi(t)\rangle_S, \tag{1.33}$$

其中, 对态矢量与力学量算子采用下标“S”或“H”, 以区别它们属于薛定谔绘景或者海森伯绘景. 未加标记的态矢狄拉克符号, 通常采用薛定谔绘景, 在不引起混淆时, 常忽略下标.

1. 薛定谔绘景

动力学原理告诉我们, 当体系哈密顿量确定后, 态矢 $|\psi(t)\rangle_S$ 决定体系的所有性质. 例如, 对体系进行某力学量测量时, 态矢可以确定被测量力学量本征值的概率分布, 即

$$\langle x|\psi(t)\rangle_S = \psi(x,t),$$
$$\langle p|\phi(t)\rangle_S = \phi(p,t),$$
$$\langle n|C(t)\rangle_S = C_n(t).$$

以上三式分别代表体系在坐标空间、动量空间以及能量空间的概率密度振幅. 另一方面, 如果已知体系在 $t=t_0$ 时的初态 $|\psi(t_0)\rangle_S$, 那么可以完全确定以后任意时间的态矢 $|\psi(t)\rangle_S$, 即在薛定谔绘景中, 有

$$|\psi(t)\rangle_S = \hat{U}(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle_S, \tag{1.34}$$

$\hat{U}(t,t_0)$ 是线性算子, 且当 $t\to t_0$ 时, 有

$$\lim_{\epsilon\to 0}\hat{U}(t_0+\epsilon,t_0) = I. \tag{1.35}$$

由概率守恒要求, 态矢的归一化应不随时间变化, 故要求

$$\hat{U}^\dagger(t,t_0)\hat{U}(t,t_0) = I,$$

即 $\hat{U}(t,t_0)$ 也是幺正算子. 由动力学原理知, 决定体系随时间演化的幺正算子 $\hat{U}(t,t_0)$ 应满足

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t,t_0) = \hat{H}\hat{U}(t,t_0), \tag{1.36}$$

满足初始条件

$$\hat{U}(t_0,t_0) = I. \tag{1.37}$$

其解可表示为

$$\ln\hat{U}(t,t_0) = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t\hat{H}(q,p,t). \tag{1.38}$$

当哈密顿量不显含时间时, (1.38) 式可形式解为

$$\hat{U}(t,t_0) = \hat{U}(t-t_0) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}}. \tag{1.39}$$

2. 海森伯绘景

海森伯绘景是将体系运动状态随时间的演化完全归因于力学量算子, 而态矢量不随时间变化. 通常令初始时刻薛定谔绘景和海森伯绘景重合, 于是有

$$|\psi\rangle_H = |\psi(t=0)\rangle_S, \quad \hat{O}_H(t=0) = \hat{O}_S. \tag{1.40}$$

随着时间的演化, 薛定谔绘景和海森伯绘景中态矢量的关系为

$$|\psi\rangle_H = \hat{U}^{-1}(t)|\psi(t)\rangle_S = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}t}\left|\psi(t)\right\rangle_S, \tag{1.41}$$

可见, 时间演化算符也是一个绘景变换算子, 它使任意时刻的态矢量从海森伯绘景转换到薛定谔绘景. 利用前面的 (1.33) 式容易得到力学量算子将作如下绘景变换

$$\hat{O}_H(t) = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}t}\hat{O}_S\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}t}. \tag{1.42}$$

显然, 系统的哈密顿算子在这两种绘景中完全相同.

在海森伯绘景中, 人们将系统状态随时间的演化完全归因于力学量随时间的改变, 因此力学量随时间的演化方程就是系统的动力学方程. 将力学量算子关于时间求导数, 得

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{O}_H(t) = -\hat{H}\hat{O}_H(t) + \hat{O}_H(t)\hat{H} = \left[\hat{O}_H(t), \hat{H}\right], \tag{1.43}$$

这就是海森伯绘景中的动力学方程, 是经典运动方程 (1.1) 的推广. 用海森伯绘景更易分析量子力学与经典力学对应, 特别是在推广到相对论情形时, 更易写成协变形式.

波函数 $\psi(x,t)$ 随时间的演化, 也可采用不同绘景来表示. 在薛定谔绘景中, 虽然态矢量随时间变化, 但由于力学量不随时间变化, 所以其本征矢即表象中的基矢不随时间变化. 与此相反, 在海森伯绘景中, 态矢量不随时间变化, 但基矢随时间变化. 因此波函数

$$\psi(x,t) = {}_S\langle x|\psi(t)\rangle_S = {}_H\langle x,t|\psi\rangle_H \tag{1.44}$$

既可用不显含 t 的薛定谔绘景基矢 $|x\rangle_S \equiv |x\rangle$ 展开, 而将时间演化归于态矢 $|\psi(t)\rangle_S$, 也可用显含 t 的海森伯绘景基矢展开, 而态矢 $|\psi\rangle_H$ 本身不显含时间.

海森伯绘景中的基矢 $|x,t\rangle_H$ 是

$$\hat{x}_H(t) = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}t}\hat{x}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}t}$$

的本征态, 即

$$\hat{x}_H(t)|x,t\rangle_H = x|x,t\rangle_H.$$

易证, 基矢

$$|x,t\rangle_H = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}t}\,|x\rangle_S$$

自然满足正交归一和完备性条件

$${}_H\langle x,t|\,x',t\rangle_H = \langle x|\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}t}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}t}\,|x'\rangle = \langle x\,|x'\rangle = \delta\,(x-x')\,,$$

$$\int \mathrm{d}x\,|x,t\rangle_{HH}\,\langle x,t| = \int \mathrm{d}x\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}t}\,|x\rangle\,\langle x|\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}t} = I. \tag{1.45}$$

必须强调的是, 海森伯绘景中的基矢所满足的正交归一和完备性条件仅在同一时刻的基矢间成立.

除以上两种绘景外, 在采用微扰方法处理问题时, 还会采用“相互作用绘景”. 后者仅在本书中第 4 章以后出现, 那时再介绍. 希望读者先对常用的薛定谔绘景及海森伯绘景熟悉应用.

1.2 费恩曼传播函数及其路径积分形式

1.2.1 费恩曼传播函数及其路径积分表述

费恩曼传播函数 对于不同时刻的态矢, 其时间演化过程具有丰富的物理内容. 例如, 假设 $t_b > t_a$, 则

$$\begin{aligned}\psi\,(x_b,t_b) &= \langle x_b|\,\psi\,(t_b)\rangle = {}_H\langle x_b,t_b|\,\psi\rangle_H \\ &= \int \mathrm{d}x_a\ {}_H\langle x_b,t_b|\,x_a,t_a\rangle_{HH}\,\langle x_a,t_a|\,\psi\rangle_H \\ &= \int \mathrm{d}x_a K\,(x_b,t_b;x_a,t_a)\,\psi\,(x_a,t_a) \quad (t_b > t_a)\end{aligned} \tag{1.46}$$

(1.46) 式很像光波传播的惠更斯原理: 粒子在 t_b 时位于 x_b 的概率幅, 正是在 t_a 时刻位于波面 Σ 上 x_a 点次级源传播的概率幅的叠加. 因此, $K\,(x_b,t_b;x_a,t_a)$ 称为费恩曼传播函数 (Feynman propagator) 或费恩曼核 (Feynman kernel)

$$\begin{aligned}K\,(x_b,t_b;x_a,t_a) &= {}_H\langle x_b,t_b|\,x_a,t_a\rangle_H \\ &= \langle x_b|\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}(t_b-t_a)\right\}|x_a\rangle \quad (t_b > t_a).\end{aligned} \tag{1.47}$$

若费恩曼传播函数已知, 便可获得体系全部的量子力学信息.

无穷维积分(泛函积分) 费恩曼传播函数有着深刻的物理意义, 是本书中研究的重点. 在实际物理问题的研究中, 费恩曼传播函数常被表示成路径积分的形式.

这里先将它表示为无穷维积分. 为简单起见, 首先讨论一维动力学体系, 且设哈密顿量不显含时间 $H=\dfrac{p^2}{2m}+V(x)$, 以后在进一步推广到高维及势能含时间的情况是很容易的.

为将费恩曼传播函数表示为路径积分形式, 将时间间隔 $T=t_b-t_a$ 等分成宽度为 ϵ 的小间隔, 即

$$\epsilon=\frac{t_b-t_a}{N}=t_{j+1}-t_j,\quad j=0,1,\cdots,N-1.$$

取 $t_0=t_a, t_N=t_b$, 而中间时间 t_j 取为

$$t_j=t_a+j\epsilon,\quad j=1,2,\cdots,N-1.$$

对每一中间时刻 t_j, 取坐标基矢的完备基 $\left\{|x_j,t_j\rangle_H\right\}$. 利用完备性关系

$$\int \mathrm{d}x_j\, |x_j,t_j\rangle_{HH}\langle x_j,t_j| = I,$$

在费恩曼传播函数 $K(x_b,t_b;x_a,t_a)$ 中插入 $(N-1)$ 个单位算子, 得

$$\begin{aligned}
&K(x_b,t_b;x_a,t_a)={}_H\langle x_b,t_b|\, I\cdots I\, |x_a,t_a\rangle_H\\
=&\int \mathrm{d}x_1\cdots \mathrm{d}x_{N-1}\,{}_H\langle x_b,t_b|\,x_{N-1},t_{N-1}\rangle_{HH}\langle x_{N-1},t_{N-1}|\,x_{N-2},t_{N-2}\rangle_H\\
&\cdots|x_1,t_1\rangle_{HH}\langle x_1,t_1|\,x_a,t_a\rangle_H\\
=&\int \mathrm{d}x_1\cdots \mathrm{d}x_{N-1} K(x_b,t_b;x_{N-1},t_{N-1})\,K(x_{N-1},t_{N-1};x_{N-2},t_{N-2})\\
&\cdots K(x_1,t_1;x_a,t_a).
\end{aligned}\tag{1.48}$$

这里要注意时间的单向性, 在计算中始终保持时间顺序, $\epsilon=t_{j+1}-t_j>0$. 因为哈密顿量不显含时间, 所以 $K(x_b,t_b;x_a,t_a)$ 仅依赖于时间差 $T=t_b-t_a$, 这样费恩曼传播函数可记为 N 个因子乘积的 $(N-1)$ 重积分

$$\begin{aligned}
K(x_b,x_a;T)&\equiv K(x_b,t_b;x_a,t_a)\\
&=\prod_{k=1}^{N-1}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x_k\prod_{j=0}^{N-1}K(x_{j+1},x_j;\epsilon).
\end{aligned}\tag{1.49}$$

取 t_b-t_a 固定, 而令 $N\to\infty$, 即 $\epsilon=\dfrac{t_b-t_a}{N}\to 0$, 便可得到无穷维积分.

短时传播函数　为获得费恩曼传播函数路径积分形式, 首先需要计算中间每一个无穷小时间间隔 $(\epsilon\to 0)$ 的费恩曼传播函数, 常称为短时传播函数 (short time kernel):

$$K\left(x_{j+1}, x_j; \epsilon\right) = \langle x_{j+1}| \exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\epsilon\hat{H}\right\}|x_j\rangle$$
$$= \langle x_{j+1}| \exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\epsilon\hat{H}_0 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\epsilon V(x)\right\}|x_j\rangle. \tag{1.50}$$

在路径积分理论中, 短时传播函数实际上就是费恩曼传播函数的微分形式. 在各种物理问题的应用中, 都是从短时传播函数的计算开始的, 因而十分重要. 另一方面, 因为哈密顿量 $\hat{H}$ 为厄米算子, 时间演化算子 $\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\epsilon\hat{H}\right\}$ 为幺正算子, 所以量子信息传播是幺正性的, 因而可由短时传播函数相乘得到全程振幅.

下面来计算短时传播函数. 注意到 (1.50) 式指数上两因子的不可交换性, 将 (1.50) 式进一步展开时要用到 Zassenhaus 公式①

$$\exp\{\epsilon(A+B)\} = \mathrm{e}^{\epsilon A}\mathrm{e}^{\epsilon B}\exp\left\{-\frac{\epsilon^2}{2}[A,B]\right\}$$
$$\times\exp\left\{\epsilon^3\left(\frac{1}{3}[B,[A,B]] + \frac{1}{6}[A,[A,B]]\right)\right\}\cdots, \tag{1.51}$$

或 BCH 公式 (Baker-Campbell-Hausdorff formula)②

$$\mathrm{e}^{\lambda A}\cdot\mathrm{e}^{\lambda B} = \exp\left\{\sum_{n=1}^{\infty}\lambda^n c_n\right\}$$
$$= \exp\left\{\lambda(A+B) + \frac{\lambda^2}{2}[A,B] + \frac{\lambda^3}{6}[c_2, B-A] + \cdots\right\}\quad\left(c_2 = \frac{1}{2}[A,B]\right), \tag{1.52}$$

且在计算中要求保留到 $O\left(\epsilon^2\right)$ 项, 以使 N 个因子相乘以后仍能保留到 $O(\epsilon)$ 项, 这样才可保证在取 $\epsilon\to 0$ 极限以后得到精确等式. 利用 Zassenhaus 公式

$$\mathrm{e}^{\epsilon(A+B)} = \mathrm{e}^{\epsilon A}\mathrm{e}^{\epsilon B}\left(1 + O\left(\epsilon^2\right)\right), \tag{1.53}$$

则 (1.50) 式变为

$$K(x_{j+1}, x_j; \epsilon) = \langle x_{j+1}|\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\epsilon\hat{H}_0\right\}\cdot\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\epsilon V(x)\right\}|x_j\rangle(1 + O(\epsilon^2))$$
$$= \int \mathrm{d}p\,\mathrm{d}x\langle x_{j+1}|\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\epsilon\hat{H}_0\right\}|p\rangle\langle p|x\rangle$$
$$\times\langle x|\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\epsilon V(x)\right\}|x_j\rangle(1 + O(\epsilon^2)).$$

---

① Suzuki M. 1979. On the convergence of exponential operator-Zassenhaus formula BCH formula and systematic approximation. Comm. Math. Phys., (57): 193~220.

② Naimark M A I. 1982. Theory of Group Representation. Berlin: Springer.

注意到

$$\langle x|\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\epsilon V(x)\right\}|x_j\rangle=\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\epsilon V\left(x_j\right)\right\}\delta\left(x-x_j\right),$$

$$\langle p|x\rangle=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px\right\},$$

$$\begin{aligned}\langle x_{j+1}|\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\epsilon\hat{H}_0\right\}|p\rangle&=\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\epsilon\frac{p^2}{2m}\right\}\langle x_{j+1}|p\rangle\\&=\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\epsilon\frac{p^2}{2m}\right\}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px_{j+1}\right\}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}},\end{aligned}$$

则短时传播函数对 x 积分后得

$$\begin{aligned}K(x_{j+1},x_j;\epsilon)=&\int\frac{\mathrm{d}p}{2\pi\hbar}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p(x_{j+1}-x_j)-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\epsilon\left(\frac{p^2}{2m}+V(x_j)\right)\right\}\\&\times(1+O(\epsilon^2)).\end{aligned}$$

再将积分宗量 $\mathrm{d}p$ 记为 $\mathrm{d}p_j$, 得

$$K\left(x_{j+1},x_j;\epsilon\right)=\int\frac{\mathrm{d}p_j}{2\pi\hbar}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_j\left(x_{j+1}-x_j\right)-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\epsilon H\left(p_j,x_j\right)\right\}\left(1+O\left(\epsilon^2\right)\right).$$

路径积分相空间表达式　将以上结果代入 (1.49) 式得

$$\begin{aligned}&K\left(x_b,t_b;x_a,t_a\right)\\&=\int\prod_{j=1}^{N-1}\mathrm{d}x_j\prod_{j=0}^{N-1}\frac{\mathrm{d}p_j}{2\pi\hbar}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{j=0}^{N-1}[p_j(x_{j+1}-x_j)-\epsilon H(p_j,x_j)]\right\}\\&\quad\times(1+O(\epsilon^2))^N\\&=\lim_{\substack{N\to\infty\\\epsilon\to0}}\int\prod_{j=1}^{N-1}\mathrm{d}x_j\prod_{j=0}^{N-1}\frac{\mathrm{d}p_j}{2\pi\hbar}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\epsilon\sum_{j=0}^{N-1}\left[p_j\frac{(x_{j+1}-x_j)}{\epsilon}-H(p_j,x_j)\right]\right\}\\&\equiv\int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b}\mathrm{D}'x(t)\frac{\mathrm{D}p(t)}{2\pi\hbar}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\left[p\left(t\right)\dot{x}\left(t\right)-H\left(p\left(t\right),x\left(t\right)\right)\right]\right\},\end{aligned}\tag{1.54}$$

这里已将无穷维积分表述为路径积分, 其积分测度常简记为

$$\int_{x_a}^{x_b}\mathrm{D}'x\frac{\mathrm{D}p}{2\pi\hbar}\equiv\lim_{N\to\infty}\prod_{j=1}^{N-1}\left[\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x_j\right]\prod_{j=0}^{N-1}\left[\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}p_j}{2\pi\hbar}\right].\tag{1.55}$$

显然, 路径积分是在坐标–动量空间中的无穷维积分, 由于坐标空间积分维数比动量空间积分维数少一维, 故打一撇 (常省略), 且 (1.54) 式中 $\mathrm{D}x(t)\mathrm{D}p(t)$ 中参数 t 是提醒被积变量为 $x(t_j)=x_j, p(t_j)=p_j$, 另外积分上下限仅端点坐标固定, 其余都取值在整个积分空间. 故 (1.54) 式也常被称为相空间路径积分, 简记为

$$K\left(x_b,t_b;x_a,t_a\right)=\int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b}\frac{\mathrm{D}'x\mathrm{D}p}{2\pi\hbar}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[p,x]}, \tag{1.56}$$

或简记为

$$K\left(x_b,t_b;x_a,t_a\right)=\int_{x_a}^{x_b}\frac{\mathrm{D}'x\mathrm{D}p}{2\pi\hbar}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[p,x]_{t_a}^{t_b}}, \tag{1.57}$$

其中, 相因子

$$S\left[p,x\right]_{t_a}^{t_b}=\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\left[p\dot{x}-H\left(p,x\right)\right]. \tag{1.58}$$

称为 "相空间作用量". 值得强调的是: ① 路径积分符号上指标 x_a, x_b 是指在时间端点上的坐标, 它们固定, 而对中间所有坐标 $x(t)$ 及所有动量 $p(t)$ 都取全空间积分. ② "相空间作用量" $S[p(t),x(t)]$ 并非通常经典力学中的作用量泛函 $S[x(t)]$, 因为在 $S[p(t),x(t)]$ 中还含有 $p(t)$. 此外在相空间不存在粒子运动的轨迹, 这是由于有测不准原理的限制, 坐标与动量不可能都连续, 或者说在相空间中 "轨道" 必然是不连续的, 例如, 对于积分端点, 坐标 x_a 和 x_b 受限制, 而动量未被限制.

1.2.2 路径积分位形空间表达式

正如前面所言, 由于坐标和动量的不可交换性, 量子力学体系的相空间中的 "点" 实际上是不存在的, 或者说, 最多也只能是个 "斑点", 那么, 自然地也就不能谈及 "轨道" 和 "路径". 因此, 还需要建立位形空间上的路径积分.

注意到短时传播函数 (1.54) 式中

$$\begin{aligned}K\left(x_{j+1},x_j;\epsilon\right)=&\int\frac{\mathrm{d}p_j}{2\pi\hbar}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_j\left(x_{j+1}-x_j\right)-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\epsilon\left(\frac{p_j^2}{2m}+V\left(x_j\right)\right)\right\}\\&\times(1+O(\epsilon^2)),\end{aligned} \tag{1.59}$$

其中, 对动量积分为高斯 (Gaussian) 型, 可预先积分

$$\begin{aligned}&\int\frac{\mathrm{d}p_j}{2\pi\hbar}\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}\epsilon}{\hbar}\left(\frac{p_j^2}{2m}-\frac{p_j\left(x_{j+1}-x_j\right)}{\epsilon}\right)\right\}\\=&\int\frac{\mathrm{d}p_j}{2\pi\hbar}\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}\epsilon}{2m\hbar}\left[\left(p_j-\frac{m}{\epsilon}\left(x_{j+1}-x_j\right)\right)^2-\left(\frac{m}{\epsilon}\left(x_{j+1}-x_j\right)\right)^2\right]\right\}\\=&\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\epsilon}\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}m\epsilon}{2\hbar}\left(\frac{x_{j+1}-x_j}{\epsilon}\right)^2\right\}.\end{aligned} \tag{1.60}$$

(1.60) 式最后一步利用到等式 (见附录 (A.5)):

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p \mathrm{e}^{-\mathrm{i}ap^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\mathrm{i}a}},$$

于是

$$K\left(x_{j+1}, x_j; \epsilon\right) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\epsilon}} \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{m}{2}\frac{\left(x_{j+1}-x_j\right)^2}{\epsilon} - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\epsilon V\left(x_j\right)\right\}\left(1+O\left(\epsilon^2\right)\right). \quad (1.61)$$

将上面短时传播函数结果代入 (1.49) 式, 可得费恩曼传播函数

$$\begin{aligned}
&K(x_b, t_b; x_a, t_a) \\
&= \lim_{\substack{N\to\infty \\ \epsilon\to 0}} \left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\epsilon}\right)^{\frac{N}{2}} \prod_{j=1}^{N-1}\left(\int \mathrm{d}x_j\right) \exp\left\{\frac{\mathrm{i}\epsilon}{\hbar}\sum_{j=0}^{N-1}\left[\frac{m}{2}\left(\frac{x_{j+1}-x_j}{\epsilon}\right)^2 - V\left(x_j\right)\right]\right\} \\
&= \mathcal{N}\int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} \mathrm{D}x(t) \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\left(\frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V\left(x\right)\right)\right\},
\end{aligned}$$

即

$$K\left(x_b, t_b; x_a, t_a\right) = \mathcal{N}\int_{x_a}^{x_b} \mathrm{D}x\left(t\right) \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} S\left[x\left(t\right)\right]_{t_a}^{t_b}\right\}, \quad (1.62)$$

这里 $\mathcal{N}$ 为归一化因子, 具有长度量纲的倒数 $\mathcal{N} \sim [l]^{-1}$, 式中

$$S\left[x\left(t\right)\right]_{t_a}^{t_b} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\left(\frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V\left(x\right)\right) \quad (1.63)$$

为经典力学中的作用量泛函. (1.62) 式称为传播函数在位形空间上的路径积分表达式.

路径积分的物理解释　关于位形空间上路径积分的物理意义通常可解释如下:

将端点 $a = (x_a, t_a)$, $b = (x_b, t_b)$ 固定, 把时间间隔 $T = t_b - t_a$ 分成 N 个相等间隔 $\epsilon = \dfrac{T}{N}$, 对于中间每一时刻 t_i 选任意点 x_i, 然后如图 1.1 将各点间用直线连接, 这样就得到由 a 到 b 的一条路径. 当 $N \to \infty$, 所得路径变为连续但无处可微. 由于要对中间所有点 x_i 取积分 $(-\infty \sim +\infty)$, 因此当 $N \to \infty$时, 整个积分变为无穷维积分. 这样所有路径都对传播函数 K 有贡献. 虽然对于每条路径是等概率的, 但是相因子 $\dfrac{S\left[x\left(t\right)\right]}{\hbar}$ 不同, 即

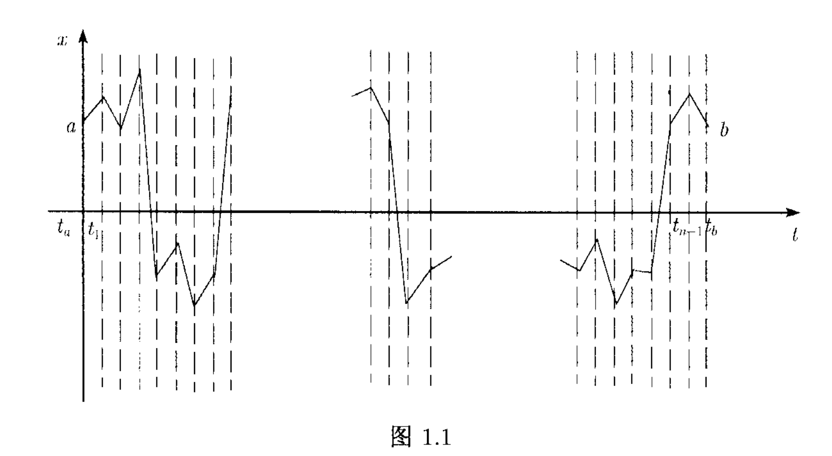


图 1.1

$$
\begin{aligned}
&K(x_b,t_b;x_a,t_a)\\
=&\mathcal{N}\int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b}\mathrm{D}x(t)\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\left(\frac{1}{2}m\dot{x}^2-V(x)\right)\right\}\\
=&\sum_{x_a\mapsto x_b\text{的所有路径}}\mathrm{const}\cdot\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x(t)]}.
\end{aligned}
\tag{1.64}
$$

显然, 用无穷维积分表示并对路径系综求和的费恩曼传播函数 $K(x_b,t_b;x_a,t_a)$ 包含了全部动力学信息, 其突出特点是: 体系经典作用量 $S[x(t)]$ 出现在量子力学的表示中! 提供了经典力学与量子力学叠加原理的联系.

量子力学中, 所有路径都对演化有贡献, 但以相因子 $\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x(t)]}$ 为权重. 因此主要贡献来自作用量稳定的路径邻域, 特别是经典作用量值相对于 $\hbar$ 很大时, 对路径积分贡献几乎完全局域在经典路径附近. 因此在费恩曼传播函数的表达式中, 既要对所有的轨道贡献求和, 用无穷维积分 (泛函积分) 形式表达量子化, 同时体现出量子涨落的结果. (1.62) 式中的因子 $\mathcal{N}$ 很复杂, 当取极限 $N\to\infty,\varepsilon\to 0$ 时, $\mathcal{N}$ 趋于无限. 但在通常物理问题的研究中, 仅需分析已归一化的传播函数, 亦即仅需分析动力学变量 $f(x)$ 的系综期待值

$$
\langle f(x)\rangle\equiv\frac{{}_H\langle x_b,t_b|\hat{f}(x(t))|x_a,t_a\rangle_H}{{}_H\langle x_b,t_b|x_a,t_a\rangle_H}=\frac{\displaystyle\int_{x_a}^{x_b}\mathrm{D}x(t)f(x(t))\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S(x(t))\right\}}{\displaystyle\int_{x_a}^{x_b}\mathrm{D}x(t)\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x(t)]\right\}}.
\tag{1.65}
$$

因此, 相应归一化因子 $\mathcal{N}$ 可以消去. 在通常的计算中 $\mathcal{N}$ 为不含动力学变量的归一化因子, 常可忽略而吸收到积分测度中. 下面通过对自由粒子及一维谐振子的讨论, 给出路径积分仅依赖于边值的传播函数的明显表达式.

1.2.3　一维自由粒子的传播函数

传播函数的表达式　自由粒子是最简单的量子力学体系, 其拉氏量函数

$$L=\frac{1}{2}m\dot{x}^2$$

代入 (1.62) 式得自由粒子费恩曼传播函数

$$K(x_b,t_b;x_a,t_a)=\lim_{\substack{N\to\infty\\ \epsilon\to 0}}\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\epsilon}\right)^{\frac{N}{2}}\int\left[\prod_{j=1}^{N-1}\mathrm{d}x_j\right]\exp\left\{\frac{\mathrm{i}\epsilon}{\hbar}\sum_{j=0}^{N-1}\frac{m}{2}\left(\frac{x_{j+1}-x_j}{\epsilon}\right)^2\right\}.$$

注意到高斯积分公式

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha x^2}=\left(\frac{\mathrm{i}\pi}{\alpha}\right)^{\frac{1}{2}},$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha[(x_2-x_1)^2+(x_1-x_0)^2]}=\left(\frac{\mathrm{i}\pi}{\alpha}\right)^{\frac{1}{2}}\frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\alpha}{2}(x_2-x_0)^2}.$$

数学归纳法可证高斯分布的半群性质, 进而可证

$$\int\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\cdots\mathrm{d}x_{N-1}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha[(x_N-x_{N-1})^2+\cdots+(x_2-x_1)^2+(x_1-x_0)^2]}$$
$$=\left(\frac{\mathrm{i}\pi}{\alpha}\right)^{\frac{N-1}{2}}\frac{1}{\sqrt{N}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\alpha}{N}(x_N-x_0)^2}. \tag{1.66}$$

现取 $\alpha=\frac{m}{2\hbar\epsilon}$, 其量纲 $[\alpha]\sim\frac{1}{[l]^2}$, 代入 (1.62) 式, 最后得一维自由粒子的传播函数为

$$\begin{aligned}K(x_b,t_b;x_a,t_a)&=\lim_{\substack{N\to\infty\\ \epsilon\to 0}}\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\epsilon}\right)^{\frac{N}{2}}\left(\frac{\mathrm{i}\pi}{\alpha}\right)^{\frac{N-1}{2}}\frac{1}{\sqrt{N}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\alpha}{N}(x_b-x_a)^2}\\&=\lim_{\substack{N\to\infty\\ \epsilon\to 0}}\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\epsilon}\right)^{\frac{1}{2}}\frac{1}{\sqrt{N}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar N\epsilon}(x_b-x_a)^2}\\&=\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar(t_b-t_a)}\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{m}{2}\frac{(x_b-x_a)^2}{t_b-t_a}\right\}.\end{aligned} \tag{1.67}$$

传播函数的性质　下面对自由粒子的传播函数进行几点分析与讨论:

(1) 在 (1.67) 式的最后结果中, 需取极限的因子 N,ϵ 不见了! 且积分结果仅依赖于边界的值. 这是自由粒子传播函数的特性之一.

(2) 指数上因子实际上为经典作用量 $S_{cl}=S[x_{cl}(t)]$, 即正是固定边界值 $a=(x_a,t_a),b=(x_b,t_b)$ 情况下, 按经典轨道 $x_{cl}(t)$ 计算所得作用量, 亦即哈密顿主函数 $S_{cl}=S(x_b,t_b;x_a,t_a)$.

事实上, 经典欧拉–拉格朗日方程

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\ddot{x} = 0$$

的解为

$$\dot{x}_{cl} = v = \text{const},$$

故经典轨迹 (由 $a \to b$)

$$x_{cl}(t) = x_a + \frac{x_b - x_a}{t_b - t_a}(t - t_a),$$

所以自由粒子经典作用量

$$S\left[x_{cl}(t)\right] = \int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t \frac{1}{2} m\dot{x}_{cl}^2 = \frac{1}{2}mv^2(t_b - t_a) = \frac{m}{2}\frac{(x_b - x_a)^2}{t_b - t_a}.$$

这样 (1.67) 式还可记为

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \left(\frac{m}{2\pi \mathrm{i}\hbar(t_b - t_a)}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S_{cl}\right\} = F(t_b - t_a)\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S_{cl}\right\}. \quad (1.68)$$

(3) 注意到 δ 函数表达式为

$$\delta(x_b - x_a) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\lim_{t\to 0}\left\{\frac{1}{\sqrt{t}}\exp\left[-\frac{(x_b - x_a)^2}{t}\right]\right\},$$

故所得传播函数满足

$$\lim_{t_b \to t_a} K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \delta(x_b - x_a). \quad (1.69)$$

易证 $K(x, t; x_a, t_a)$ 满足自由粒子的薛定谔方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}K(x, t; x_a, t_a) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}K(x, t; x_a, t_a) \quad (1.70)$$

这是因为薛定谔方程具有无穷多解, 通常的平面波解是具有确定动量的解, 而费恩曼传播函数 (1.67) 式是满足边界条件 (1.69) 式的解.

(4) 对于自由粒子, 也可用量子力学时间演化算子 $U(t) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}t}$ 的矩阵元直接算出

$$\begin{aligned} K(x_b, t_b; x_a, t_a) &= \langle x_b| \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}(t_b - t_a)} |x_a\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}p}{2\pi\hbar}\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p^2}{2m}(t_b - t_a) + \frac{\mathrm{i}}{\hbar}p(x_b - x_a)\right], \end{aligned}$$

对 p 积分后可得 (1.67) 式相同结果.

1.3　费恩曼传播函数与迹核函数 (量子配分函数)

在 1.2 节, 将费恩曼传播函数 K 用无穷维积分表示, 本节分析它的特性表明路径积分量子化与其他量子化之间的关系, 表明费恩曼传播函数满足薛定谔方程, 并分析它与格林 (Green) 函数的关系.

1.3.1　费恩曼路径积分与薛定谔方程的等价性

在 1.1 节曾指出费恩曼传播函数 $K(x_b,t_b;x_a,t_a)$ 为波函数 $\psi(x,t)$ 满足的积分方程的核, 即

$$\psi(x,t)=\int \mathrm{d}x_a K(x,t;x_a,t_a)\,\psi(x_a,t_a), \tag{1.71}$$

而此积分核可用无穷维泛函积分表示为 (1.62) 式. 为了证明 (1.62) 式与通常量子力学表达式等价, 可将 (1.62) 式带入 (1.71) 式, 证明这样得到的波函数 $\psi(x,t)$ 满足薛定谔方程 $\left(\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}-\hat{H}\right)\psi(x,t)=0$. 首先设法求 $\psi(x,t)$ 对时间的导数, 为此将 $\psi(x,t+\epsilon)$ 按无穷小量 ϵ 展开

$$\psi(x,t+\epsilon)=\int \mathrm{d}y K(x,t+\epsilon;y,t)\,\psi(y,t), \tag{1.72}$$

由 (1.61) 式知

$$K(x,t+\epsilon;y,t)=\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\epsilon}\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}\epsilon}{\hbar}\left[\frac{m}{2}\left(\frac{x-y}{\epsilon}\right)^2-V(x)\right]\right\}(1+O(\epsilon^2)).$$

带入 (1.72) 式并改变积分变量 $y\to x+\eta$, 得

$$\begin{aligned}\psi(x,t+\epsilon)=&\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\epsilon}\right)^{\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\eta\exp\left\{\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar\epsilon}\eta^2\right\}\left[1-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\epsilon V(x+\eta)\right]\\&\times\psi(x+\eta,t)(1+O(\epsilon^2)).\end{aligned}$$

由于 ϵ 很小, 所以如果 η 很大, 第一项中的指数因子快速振荡, 这些贡献相互抵消, 所以积分的主要贡献来自积分区: $0\leqslant|\eta|\leqslant\left(\dfrac{2\pi\hbar\epsilon}{m}\right)^{\frac{1}{2}}$. 于是将被积函数 $\psi(x+\eta,t), V(x+\eta)$ 等按泰勒级数展开, 且保持到 ϵ 阶. 利用以下公式

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\eta\exp\left\{\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar\epsilon}\eta^2\right\}=\left(\frac{2\pi\mathrm{i}\hbar\epsilon}{m}\right)^{\frac{1}{2}},$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\eta \cdot \eta \exp\left\{\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar\epsilon}\eta^2\right\} = 0,$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\eta \cdot \eta^2 \exp\left\{\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar\epsilon}\eta^2\right\} = \frac{\mathrm{i}\hbar\epsilon}{m}\left(\frac{2\pi\mathrm{i}\hbar\epsilon}{m}\right)^{\frac{1}{2}},$$

对展开式处理后得

$$\begin{aligned}\psi(x,t+\epsilon) =& \left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\epsilon}\right)^{\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\eta \exp\left\{\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar\epsilon}\eta^2\right\}\left(1-\frac{\mathrm{i}\epsilon}{\hbar}V(x)+O\left(\epsilon^2\right)\right)\\ &\times\left(\psi(x,t)+\eta\psi'(x,t)+\frac{\eta^2}{2}\psi''(x,t)+O(\eta^3)\right)\\ =&\,\psi(x,t)-\frac{\mathrm{i}\epsilon}{\hbar}V(x)\psi(x,t)+\frac{\mathrm{i}\hbar\epsilon}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t)+O(\epsilon^2).\end{aligned} \tag{1.73}$$

(1.73) 式表明

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \lim_{\epsilon\to 0}\frac{\psi(x,t+\epsilon)-\psi(x,t)}{\epsilon} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(V(x)-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\psi(x,t),$$

正是波函数 $\psi(x,t)$ 满足的薛定谔方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right)\psi(x,t). \tag{1.74}$$

可见费恩曼传播函数的路径积分表述包含了薛定谔方程表述, 二者是等价的.

从另一方面讲, 将费恩曼传播函数 $K(x,t;x_0,t_0) = \langle x|\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}|x_0\rangle$ 直接对时间求导数, 得

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}K(x,t;x_0,t_0) =& \langle x|\hat{H}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}|x_0\rangle\\ =& \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right)K(x,t;x_0,t_0),\end{aligned}$$

即费恩曼传播函数满足薛定谔方程

$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-H(x,t)\right)K(x,t;x_a,t_a) = 0, \tag{1.75}$$

及边界条件

$$K(x_b,t;x_a,t) = {}_H\langle x_b,t|\,x_a,t\rangle_H = \delta(x_b-x_a). \tag{1.76}$$

1.3.2 格林函数与迹核函数

格林函数 费恩曼传播函数与熟知的格林函数有着密切的联系. 因此, 借助格林函数可以将路径积分理论应用到许多物理领域.

注意到费恩曼传播函数中时间参变量的单向性, $t_b > t_a$, 可以引入格林函数

$$G\left(x_b, t_b; x_a, t_a\right) \equiv K\left(x_b, t_b; x_a, t_a\right) \Theta\left(t_b - t_a\right), \tag{1.77}$$

其中, 阶梯函数

$$\Theta(t) = \begin{cases} 0, & 当\ t < 0 \\ 1, & 当\ t \geqslant 0 \end{cases}$$

满足

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\Theta\left(t\right) = \delta\left(t\right).$$

这样引入的格林函数满足非齐次薛定谔方程

$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}\right) G\left(x_b, t; x_a, 0\right) = \mathrm{i}\hbar\delta\left(x_b - x_a\right)\delta\left(t\right), \tag{1.78}$$

因此格林函数是时间演化算子

$$\hat{U}(t) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}t}\Theta(t) \tag{1.79}$$

在薛定谔表象下的矩阵元

$$\begin{aligned} G(x_b, t_b; x_a, t_a) &= \langle x_b | \hat{U}(t_b - t_a) | x_a \rangle \\ &= K(x_b, t_b; x_a, t_a)\Theta(t_b - t_a). \end{aligned} \tag{1.80}$$

对于保守力体系, 格林函数在能量表象中具有如下简单的形式:

$$\begin{aligned} G(x_b, x_a; t) &= \langle x_b | \hat{U}(t) | x_a \rangle = \sum_n \langle x_b | n \rangle \langle n | \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}t} | x_a \rangle \\ &= \sum_n \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_n t}\psi_n(x_b)\psi_n^*(x_a). \end{aligned} \tag{1.81}$$

格林函数及费恩曼传播函数都包含了体系的全部动力学信息, 在量子场论、统计物理等领域中具有广泛的应用.

迹核函数　费恩曼传播函数实际上也是波函数满足的积分方程的积分核, 因此也常被称为费恩曼核. 分析研究费恩曼核的迹 (称为迹核函数) 有着重要的意义. 对保守力体系, 哈密顿量不显含时间, 可对费恩曼核取迹, 得体系的迹核函数为

$$\begin{aligned} Z(T) &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x K(x, T; x, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \langle x | \exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}T\right\} | x \rangle \\ &= \mathrm{tr}(\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}T}) = \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_n T\right\} \end{aligned}$$

将 (1.62) 式代入

$$
\begin{aligned}
Z(T) &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\mathcal{N} \int_{x_a}^{x_b} \mathrm{D}'x(t)\,(t) \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} S\left[x\left(t\right)\right]_{t_a}^{t_b}\right\} \\
&= \int_{x(T)=x(0)} \mathrm{D}x(t)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}} \int_0^T \mathrm{d}t\left(\frac{1}{2}m\dot{x}(t)^2 - V(x(t))\right),
\end{aligned} \tag{1.82}
$$

迹核函数 $Z(T)$ 为不含量纲的物理量, (1.82) 式中 $\mathcal{N}$ 已经吸收到积分测度 $\mathrm{D}x(t)$ 中, 全部 N 维 ($N \to \infty$) 空间积分都是取全空间积分. 也可将 (1.82) 式简记为

$$
Z(T) = \int \mathrm{D}x(t) \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} S[x(t)]_0^T\right\},
$$

这里迹核函数 $Z(T)$ 体现了量子态的全部信息, 是重点分析的对象. 由于迹核函数 $Z(T)$ 在形式上很像统计物理配分函数 $Z = \sum_n \mathrm{e}^{-\beta E_n}$, 故又称为量子配分函数.

在路径积分的计算中, 常利用虚时延拓 (称为"欧几里得技术") 得到有意义的结果. 这是因为通常体系的能量本征值下有界上无界, 因此可将时间参量 t 解析延拓到下半复平面. 做 Wick 转动,

$$
t \to -\mathrm{i}\tau,
$$

即在复 t 平面转动积分回路使其变为欧几里得路径积分:

$$
Z(T) = \int_{x(T)=x(0)} \mathrm{D}x(\tau)\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}\int_0^T \mathrm{d}t\frac{1}{2}m\dot{x}(\tau)^2 - V(x(\tau))}. \tag{1.83}
$$

通常还将保守力体系格林函数定义成费恩曼传播函数的傅里叶变换 (称为 z 空间格林函数)

$$
\begin{aligned}
\mathcal{G}(x_b, x_a; z) &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}zt} K(x_b, x_a; t)\theta(t) \\
&= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar} \int_0^{\infty} \mathrm{d}t \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(z + \mathrm{i}\epsilon)t\right\} K(x_b, x_a; t) \quad (\epsilon \to 0^+) \\
&= \sum_n \frac{\Psi_n(x_b)\Psi_n^*(x_a)}{z - E_n + \mathrm{i}\epsilon} \quad (\epsilon \to 0^+),
\end{aligned} \tag{1.84}
$$

其中, 附加 $\epsilon \to 0^+$ 是引入的收敛因子, 在计算结束后再取 $\epsilon \to 0^+$. 由于 $\hat{H}$ 的本征值为实数, z 空间格林函数在复 z 平面上除实轴外都解析. 就 (1.84) 式而言, 其极点为束缚态本征值, 而该点留数决定束缚态波函数. 如果 $\hat{H}$ 的本征值存在连续谱, (1.84) 式中求和号应代以沿 E 轴积分, 则 z 空间格林函数有一条割线.

1.4　一维谐振子

前两节中, 已对费恩曼传播函数 (费恩曼核) 及其路径积分表述进行了详细的介绍, 并对其基本的物理意义及基本特性作了简单的分析与讨论. 本节和 1.5 节将路径积分理论运用到几个常见的简单量子力学体系, 以便能够更好地熟悉与掌握路径积分技术.

谐振子的传播函数　一维谐振子是一个最常见的精确可解的量子力学体系, 其拉氏量为

$$L=\frac{1}{2}m\dot{x}^2-\frac{1}{2}m\omega^2x^2.$$

利用 (1.61) 式, 则体系的短时传播函数为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{K}(x_{j+1},x_j;\epsilon)&=\sqrt{\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\epsilon}}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}\epsilon}{\hbar}\frac{m}{2}\left[\frac{(x_{j+1}-x_j)^2}{\epsilon^2}-\omega^2\frac{1}{2}(x_{j+1}^2+x_j^2)\right]\right\}(1+O(\epsilon^2))\\&=\sqrt{\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\epsilon}}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[a_0(x_{j+1}^2+x_j^2)-2b_0x_{j+1}x_j]\right\}(1+O(\epsilon^2)),\end{aligned}$$

其中,

$$a_0=\frac{m}{2\epsilon}\left[1-2\left(\frac{\omega\epsilon}{2}\right)^2\right],\quad b_0=\frac{m}{2\epsilon}. \tag{1.85}$$

代入 (1.62) 式得费恩曼传播函数

$$\begin{aligned}K(x_b,t_b;x_a,t_a)&=\lim_{\substack{N\to\infty\\\epsilon\to0}}\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\epsilon}\right)^{\frac{N}{2}}\left[\prod_{j=1}^{N-1}\int\mathrm{d}x_j\right]\\&\quad\times\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{j=0}^{N-1}[a_0(x_{j+1}^2+x_j^2)-2b_0x_{j+1}x_j]\right\}\\&=\lim_{N\to\infty}A_1\left[\prod_{j=1}^{N-1}\int\mathrm{d}x_j\right]\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\phi_1\right\}\\&=\lim_{N\to\infty}A_2\left[\prod_{j=2}^{N-1}\int\mathrm{d}x_j\right]\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\phi_2\right\}\\&=\lim_{N\to\infty}A_k\left[\prod_{j=k}^{N-1}\int\mathrm{d}x_j\right]\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\phi_k\right\}\\&=\lim_{N\to\infty}A_N\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\phi_N\right\}.\end{aligned}\tag{1.86}$$

下面来对 (1.86) 式中的计算过程加以说明. 首先与 1.4 节对自由粒子的直接计算类似, 逐次对 x_1, $x_2,\cdots,x_{N-1}$ 作积分, 直到得到最后表达式. (1.86) 式中的

$$A_1=\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\epsilon}\right)^{\frac{N}{2}},$$

$$\phi_1=\sum_{j=2}^{N-1}[a_0(x_{j+1}^2+x_j^2)-2b_0x_{j+1}x_j]+\alpha_1,$$

其中, α_1 为 ϕ_1 中含有 x_1 的项 ($j=0$ 与 $j=1$ 的项), 即

$$\begin{aligned}\alpha_1&=a_0(x_2^2+x_0^2)+2a_0\left[x_1-\frac{b_0}{2a_0}(x_2+x_0)\right]^2-\frac{b_0^2}{2a_0}(x_2+x_0)^2\\&=2a_0\left[x_1-\frac{b_0}{2a_0}(x_2+x_0)\right]^2+a_1(x_2^2+x_0^2)-2b_1x_2x_0,\end{aligned}$$

其中,

$$a_1=a_0-\frac{b_0^2}{2a_0},\quad b_1=\frac{b_0^2}{2a_0}. \tag{1.87}$$

对 x_1 积分后得

$$A_2=A_1\left(\frac{\mathrm{i}\pi\hbar}{2a_0}\right)^{\frac{1}{2}},$$

$$\phi_2=\sum_{j=2}^{N-1}[a_0(x_{j+1}^2+x_j^2)-2b_0x_{j+1}x_j]+a_1(x_2^2+x_0^2)-2b_1x_2x_0,$$

这样逐步积分, 所得各因子形式均相似. 在对 $x_1,x_2,\cdots,x_{k-1}$ 积分后, 得 ϕ_k 具有如下形式:

$$\begin{aligned}\phi_k&=\sum_{j=k}^{N-1}[a_0(x_{j+1}^2+x_j^2)-2b_0x_{j+1}x_j]+a_{k-1}(x_k^2+x_0^2)-2b_{k-1}x_kx_0\\&=\sum_{j=k+1}^{N-1}[a_0(x_{j+1}^2+x_j^2)-2b_0x_{j+1}x_j]+\alpha_k,\end{aligned}$$

其中,

$$\begin{aligned}\alpha_k&=[a_0(x_{k+1}^2+x_k^2)-2b_0x_{k+1}x_k+a_{k-1}(x_k^2+x_0^2)-2b_{k-1}x_kx_0]\\&=a_0x_{k+1}^2+a_{k+1}x_0^2+(a_0+a_{k-1})\left(x_k-\frac{b_0x_{k+1}+b_{k-1}x_0}{a_0+a_{k-1}}\right)^2\\&\quad-\frac{(b_0x_{k+1}+b_{k-1}x_0)^2}{a_0+a_{k-1}},\end{aligned}$$

再对 x_k 积分后得

$$A_{k+1} = A_k\sqrt{\frac{\mathrm{i}\pi\hbar}{a_0 + a_{k-1}}}.$$

于是

$$\begin{aligned}\phi_{k+1} = &\sum_{j=k+1}^{N-1}[a_0(x_{j+1}^2 + x_j^2) - 2b_0 x_{j+1}x_j] + a_0 x_{k+1}^2 \\ &+ a_{k-1}x_0^2 - \frac{(b_0 x_{k+1} + b_{k-1}x_0)^2}{a_0 + a_{k-1}} \\ = &\sum_{j=k+1}^{N-1}[a_0(x_{j+1}^2 + x_j^2) - 2b_0 x_{j+1}x_j] + a_k x_{k+1}^2 \\ &+ a_k' x_0^2 - 2b_k x_{k+1}x_0,\end{aligned} \tag{1.88}$$

其中,

$$a_k = a_0 - \frac{b_0^2}{a_0 + a_{k-1}}, \quad b_k = \frac{b_0 b_{k-1}}{a_0 + a_{k-1}}, \tag{1.89}$$

$$a_k' = a_{k-1} - \frac{b_{k-1}^2}{a_0 + a_{k-1}}.$$

如果 $a_k = a_k'$, 即

$$\begin{aligned}a_0^2 - a_{k-1}^2 &= b_0^2 - b_{k-1}^2, \\ a_{k-1}^2 &= b_{k-1}^2 + a_0^2 - b_0^2,\end{aligned} \tag{1.90}$$

则 ϕ_{k+1} 的形式与 ϕ_k 相同. (1.90) 式当 $k=1$, $k=2$ 时均正确, 因为由 (1.87) 式知

$$a_1^2 - b_1^2 = \left(a_0 - \frac{b_0^2}{2a_0}\right)^2 - \left(\frac{b_0^2}{2a_0}\right)^2 = a_0^2 - b_0^2.$$

用数学归纳法可证 (1.88) 式和 (1.89) 式对 $k = 1, 2, 3, \cdots$ 均成立, 并推得

$$A_N = A_{N-1}\sqrt{\frac{\mathrm{i}\pi\hbar}{a_0 + a_{N-2}}} = \left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\epsilon}\right)^{\frac{N}{2}}\prod_{k=1}^{N-1}\sqrt{\frac{\mathrm{i}\pi\hbar}{a_0 + a_{k-1}}},$$

$$\phi_N = a_{N-1}(x_N^2 + x_0^2) - 2b_{N-1}x_N x_0.$$

代入 (1.86) 式后, 一维谐振子的费恩曼传播函数为

$$\begin{aligned}K(x_b, t_b; x_a, t_a) = &\lim_{\substack{N\to\infty \\ \epsilon\to 0}}\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\epsilon}\right)^{\frac{1}{2}}\left[\prod_{k=1}^{N-1}\left(\frac{m}{2\epsilon}\frac{1}{a_0 + a_{k-1}}\right)\right]^{\frac{1}{2}} \\ &\times\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[a_{N-1}(x_N^2 + x_0^2) - 2b_{N-1}x_N x_0]\right\},\end{aligned} \tag{1.91}$$

(1.91) 式中的各系数 a_k, b_k 可由下面递推关系式推出, 即

$$a_0 = b_0\left(1 - 2\left(\frac{\omega\epsilon}{2}\right)^2\right), \quad b_0 = \frac{m}{2\epsilon}, \tag{1.92}$$

$$a_{k-1} = (b_{k-1}^2 + a_0^2 - b_0^2)^{1/2}, \quad b_k = \frac{b_0 b_{k-1}}{a_0 + a_{k-1}}. \tag{1.93}$$

为获得费恩曼传播函数即 (1.91) 式在大 N 极限下的最终结果, 必须先求出当 $N \to \infty(\epsilon \to 0)$ 时各 a_k, b_k 的值. 注意到上面递推式的特点, 引入 $\tilde{\omega}$, 有

$$\frac{1}{2}\omega\epsilon = \sin\frac{1}{2}\tilde{\omega}\epsilon, \tag{1.94}$$

当 $N \to \infty$ 时, 有

$$\tilde{\omega} = \tilde{\omega}(\omega, \epsilon) \to \omega,$$

这样

$$a_0 = b_0\left(1 - 2\sin^2\frac{1}{2}\tilde{\omega}\epsilon\right) = b_0\cos\tilde{\omega}\epsilon\ ,$$

而

$$\frac{1}{b_k} = \frac{\cos\tilde{\omega}\epsilon}{b_{k-1}} + \frac{1}{b_0}\sqrt{1 - \frac{b_0^2}{b_{k-1}^2}\sin^2\tilde{\omega}\epsilon}\ . \tag{1.95}$$

在 (1.95) 式中令 $k=1$ 得

$$\frac{1}{b_1} = \frac{1}{b_0}(\cos\tilde{\omega}\epsilon + \sqrt{1 - \sin^2\tilde{\omega}\epsilon}) = \frac{2\cos\tilde{\omega}\epsilon}{b_0} = \frac{\sin 2\tilde{\omega}\epsilon}{b_0\sin\tilde{\omega}\epsilon} \tag{1.96}$$

再令 $k=2$, 得

$$\begin{aligned}\frac{1}{b_2} &= \frac{\cos\tilde{\omega}\epsilon}{b_1} + \frac{1}{b_0}\sqrt{1 - \frac{b_0^2}{b_1^2}\sin^2\tilde{\omega}\epsilon} \\ &= \frac{1}{b_1}\left(\cos\tilde{\omega}\epsilon + \frac{\sin\tilde{\omega}\epsilon}{\sin 2\tilde{\omega}\epsilon}\sqrt{1 - \sin^2\tilde{\omega}\epsilon}\right) = \frac{\sin 3\tilde{\omega}\epsilon}{b_1\sin 2\tilde{\omega}\epsilon} \\ &= \frac{\sin 3\tilde{\omega}\epsilon}{b_0\sin\tilde{\omega}\epsilon},\end{aligned}$$

以此类推, 可以得

$$\frac{1}{b_{k-1}} = \frac{\sin k\tilde{\omega}\epsilon}{b_0\sin\tilde{\omega}\epsilon}.$$

事实上这一结论还可以用归纳法来证明, 即假定上式成立并代入 (1.95) 式后得

$$\frac{1}{b_k} = \frac{1}{b_{k-1}}\left(\cos\tilde{\omega}\epsilon + \frac{\sin\tilde{\omega}\epsilon}{\sin k\tilde{\omega}\epsilon}\sqrt{1 - \sin^2 k\tilde{\omega}\epsilon}\right)$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{\sin(k+1)\tilde{\omega}\epsilon}{b_{k-1}\sin k\tilde{\omega}\epsilon} \\
&= \frac{\sin(k+1)\tilde{\omega}\epsilon}{b_0 \sin\tilde{\omega}\epsilon},
\end{aligned}
$$

其形式与 (1.96) 式相同, 又因为上式在 $k=1$, $k=2$ 时均成立, 这样由归纳法得知, 上式对任意 k 值都成立. 因此有

$$
b_k = \frac{m}{2\epsilon}\frac{\sin\tilde{\omega}\epsilon}{\sin(k+1)\tilde{\omega}\epsilon}, \tag{1.97}
$$

而

$$
a_k = (b_k^2 + a_0^2 - b_0^2)^{\frac{1}{2}} = b_k\sqrt{1 - \frac{b_0^2}{b_k^2}\sin^2\tilde{\omega}\epsilon} = \frac{m\sin\tilde{\omega}\epsilon}{2\epsilon}\frac{\cos(k+1)\tilde{\omega}\epsilon}{\sin(k+1)\tilde{\omega}\epsilon},
$$

那么

$$
a_0 + a_{k-1} = b_0\left(\cos\tilde{\omega}\epsilon + \sin\tilde{\omega}\epsilon\frac{\cos k\tilde{\omega}\epsilon}{\sin k\tilde{\omega}\epsilon}\right) = \frac{m}{2\epsilon}\frac{\sin(k+1)\tilde{\omega}\epsilon}{\sin k\tilde{\omega}\epsilon}.
$$

将以上结果代入 (1.91) 式便得一维谐振子费恩曼传播函数的最终结果

$$
\begin{aligned}
K(x_b, t_b; x_a, t_a) &= \lim_{\substack{N\to\infty \\ \epsilon\to 0}} \left(\frac{m}{2\pi \mathrm{i}\hbar\epsilon}\right)^{\frac{1}{2}} \left[\prod_{k=1}^{N-1}\frac{\sin k\tilde{\omega}\epsilon}{\sin(k+1)\tilde{\omega}\epsilon}\right]^{\frac{1}{2}} \\
&\quad \times \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[\frac{m\sin\tilde{\omega}\epsilon}{2\epsilon}\frac{\cos N\tilde{\omega}\epsilon}{\sin N\tilde{\omega}\epsilon}(x_N^2 + x_0^2) - \frac{m}{\epsilon}\frac{\sin\tilde{\omega}\epsilon}{\sin N\tilde{\omega}\epsilon}x_N x_0\right]\right\} \\
&= \left(\frac{m\omega}{2\pi \mathrm{i}\hbar\sin\omega T}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{m\omega}{2\sin\omega T}\left[\cos\omega T(x_b^2 + x_a^2) - 2x_b x_a\right]\right\}.
\end{aligned} \tag{1.98}
$$

谐振子传播函数的基本特性 现在对所得结果进行分析与讨论.

(1) 与自由粒子的结果相似, 在 (1.98) 式最后一行, 需取极限的因子 N, ϵ 不见了, 且最后结果仅依赖边界条件的取值. 此外对 (1.98) 式取 $\omega \to 0$ 极限, 还可获得自由粒子费恩曼传播函数 (1.67) 式.

(2) 谐振子传播函数指数上因子实际上为经典作用量 $S_{cl} = S[x_{cl}(t)]$.

事实上由一维谐振子的拉氏量可知, 欧拉–拉格朗日方程为

$$
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial L}{\partial x} = m(\ddot{x} + \omega^2 x) = 0,
$$

对于固定边值 $a = (x_a, t_a), b = (x_b, t_b)$, 由 $a \to b$ 的经典轨道为

$$
x_{cl}(t) = \frac{x_b\sin\omega(t - t_a) + x_a\sin\omega(t_b - t)}{\sin\omega(t_b - t_a)}. \tag{1.99}
$$

另外, 经典作用量

$$
\begin{aligned}
S[x_{cl}(t)] &= \frac{m}{2}\int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t(\dot{x}_{cl}^2 - \omega^2 x_{cl}^2) \\
&= \frac{m}{2}\int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t[x_{cl}(-\ddot{x}_{cl} - \omega^2 x_{cl})] + \frac{m}{2} x_{cl}\dot{x}_{cl}\Big|_{t_a}^{t_b},
\end{aligned}
$$

再利用经典欧拉–拉格朗日方程 (在质壳上), 上式第一项为零, 所以

$$
S[x_{cl}(t)] = \frac{m}{2} x_{cl}\dot{x}_{cl}\Big|_{t_a}^{t_b}. \tag{1.100}
$$

由 (1.99) 式可知经典轨道对时间的一阶导数为

$$
\dot{x}_{cl}(t_a) = \frac{\omega}{\sin\omega(t_b - t_a)}[x_b - x_a \cos\omega(t_b - t_a)]
$$

和

$$
\dot{x}_{cl}(t_b) = \frac{\omega}{\sin\omega(t_b - t_a)}[x_b \cos\omega(t_b - t_a) - x_a],
$$

这样, 代入 (1.100) 式, 得其作用量

$$
\begin{aligned}
S[x_{cl}(t)] = &\frac{m}{2}\frac{\omega}{\sin^2\omega(t_b - t_a)}[(x_b\cos\omega(t_b - t_a) - x_a)\cdot(x_b\sin\omega(t_b - t_a)) \\
&-(x_b - x_a\cos\omega(t_b - t_a))(x_a\sin\omega(t_b - t_a))] \\
= &\frac{m}{2}\frac{\omega}{\sin\omega(t_b - t_a)}[\cos\omega(t_b - t_a)(x_b^2 + x_a^2) - 2x_b x_a]
\end{aligned} \tag{1.101}
$$

(3) 与 δ 函数的表达式比较可知, 所得费恩曼传播函数 (1.98) 式满足条件

$$
K(x_b, t; x_a, t) = \delta(x_b - x_a). \tag{1.102}
$$

(4) 对所得费恩曼传播函数取迹, 即对相应格林函数取迹, 则有

$$
\begin{aligned}
\int \mathrm{d}x_0 K(x_0, T; x_0, 0) &= \mathrm{tr}(\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}T}) \\
&= \left(\frac{m\omega}{2\pi\mathrm{i}\hbar\sin\omega T}\right)^{\frac{1}{2}} \int \mathrm{d}x \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{m\omega}{\sin\omega T}[\cos\omega T - 1]x^2} \\
&= \left(\frac{m\omega}{2\pi\mathrm{i}\hbar\sin\omega T}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\mathrm{i}\pi\hbar\sin\omega T}{m\omega(\cos\omega T - 1)}\right)^{\frac{1}{2}} \\
&= \frac{1}{2\mathrm{i}\sin\dfrac{\omega T}{2}} = \frac{1}{\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\omega T}{2}} - \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\omega T}{2}}} = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\omega T}{2}}\frac{1}{1 - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega T}} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left[-\mathrm{i}\left(n + \frac{1}{2}\right)\omega T\right],
\end{aligned} \tag{1.103}
$$

由此可知谐振子束缚态能级

$$E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \cdots . \tag{1.104}$$

再由能量表象中的费恩曼传播函数 (1.81) 式

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \sum_n \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_n(t_b - t_a)}\psi_n(x_b)\psi_n^*(x_a), \tag{1.105}$$

令 $\tau = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$, 有

$$2\mathrm{i}\sin\omega t = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}(1-\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\omega t}) = \frac{1}{\tau}(1-\tau^2),$$

$$2\cos\omega t = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}(1+\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\omega t}) = \frac{1}{\tau}(1+\tau^2),$$

则

$$\begin{aligned}
K(x,t;y,0) &= \left(\frac{m\omega}{2\pi\mathrm{i}\hbar\sin\omega t}\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}m\omega}{2\hbar\sin\omega t}[(x^2+y^2)]\cos\omega t - 2xy\right\} \\
&= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}(\tau^{-1}(1-\tau^2))^{-\frac{1}{2}}\exp\left\{-\frac{m\omega}{\hbar}\frac{\tau}{1-\tau^2}\left[(x^2+y^2)\frac{1+\tau^2}{2\tau} - 2xy\right]\right\} \\
&= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x^2+y^2)}\tau^{\frac{1}{2}}(1-\tau^2)^{-\frac{1}{2}}\exp\left\{\frac{m\omega}{\hbar}[-(x^2+y^2)\tau^2+2xy\tau]\frac{1}{1-\tau^2}\right\}.
\end{aligned}$$

将所得结果与厄米多项式双线性母函数公式 (Mehler 公式)[1] 对比

$$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(t/2)^n}{n!}H_n(x)H_n(y) = (1-t^2)^{-\frac{1}{2}}\exp\left[\frac{-(x^2+y^2)t^2+2xyt}{1-t^2}\right], \tag{1.106}$$

其中, $H_n(x)$ 是厄米多项式, 得到

$$\begin{aligned}
&K(x,t;y,0) \\
&= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x^2+y^2)}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!2^n}H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}y\right)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(n+\frac{1}{2})\hbar\omega t}.
\end{aligned}$$

进一步, 很容易通过比较得到, 一维谐振子的波函数为

$$\psi_n(x) = 2^{-\frac{n}{2}}(n!)^{-\frac{1}{2}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right), \tag{1.107}$$

相应的能量本征值为

$$E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \tag{1.108}$$

这些结果与量子力学中其他方法所得结果相同.

① 王竹溪, 郭敦仁. 2000. 特殊函数概论. 北京：北京大学出版社, 376.

1.5 一维无限深方势阱中的粒子

对于一维无限深方势阱中的粒子, 其势函数为

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < L, \\ \infty, & x \leqslant 0, \quad x \geqslant L, \end{cases}$$

边界值为

$$a = (x_a, t_a), \quad b = (x_b, t_b).$$

对于阱中的粒子, 由 $a \to b$ 有无穷多可能路径, 其中经典自由传播路径包括 (图 1.2):

(1) 由 $a \to b$ 直接自由传播的路径, 如图中的路径 1;

(2) 在势墙上反弹若干次后由 a 到达 b 的路径.

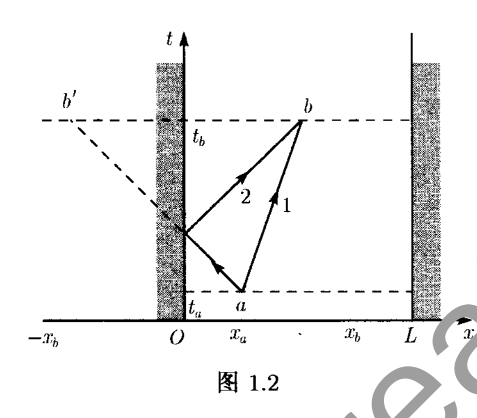


图 1.2

在图 1.2 中, 由 $a \to b' = (-x_b, t_b)$ 的路径, 相当于反弹一次的路径, 如图 1.2 中的路径 2, 因而每反弹一次路径距离都要增加, 而时间间隔仍为 $(t_b - t_a)$.

利用态叠加原理, 由 (1.68) 式得

$$\begin{aligned} K_L(x_b, t_b; x_a, t_a) = F(t_b - t_a)\Bigg\{ & \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{m}{2}\frac{(x_b - x_a)^2}{t_b - t_a}\right\} \\ & - \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{m}{2}\frac{(-x_b - x_a)^2}{t_b - t_a}\right\} + \cdots \Bigg\}. \end{aligned} \tag{1.109}$$

(1.109) 式第二项前的负号是由于弹性反弹作用, 势垒反弹处为节点而引起的. 粒子在由 $a \to b$ 的路径, 包括粒子在左右两边无穷多次反弹后由 $a \to b$ 的路径, 所以应考虑所有这些无穷多次反弹的经典路径之和, 每次碰到墙要乘以 -1, 中间为自由

运动, 结果为

$$
\begin{aligned}
K_L(x_b,t_b;x_a,t_a) &= \sum_{r=-\infty}^{+\infty}(-1)^r K(x_r,t_b;x_a,t_a) \\
&= \sum_{r=-\infty}^{+\infty}\int\frac{\mathrm{d}p}{2\pi\hbar}\left[\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p^2}{2m}(t_b-t_a)+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p(2rL+x_b-x_a)\right\}\right. \\
&\quad \left.-\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p^2}{2m}(t_b-t_a)+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p(2rL-x_b-x_a)\right\}\right] \\
&= \int\frac{\mathrm{d}p}{2\pi\hbar}\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p^2}{2m}(t_b-t_a)\right\}\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px_a\right\} \\
&\quad \times\left(\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px_b\right\}-\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px_b\right\}\right)\sum_{r=-\infty}^{+\infty}\exp\left\{\frac{2\mathrm{i}rLp}{\hbar}\right\},
\end{aligned}
$$

利用泊松求和公式

$$
\sum_{m=-\infty}^{+\infty}\exp\{2\pi\mathrm{i}m\mu\}=\sum_{n=-\infty}^{+\infty}\delta(\mu-n), \tag{1.110}
$$

得

$$
\begin{aligned}
K_L(x_b,t_b;x_a,t_a) &= 2\mathrm{i}\int\frac{\mathrm{d}p}{2\pi\hbar}\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p^2}{2m}(t_b-t_a)\right\} \\
&\quad \times\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px_a\right\}\sin\frac{px_b}{\hbar}\sum_{n=-\infty}^{+\infty}\delta\left(\frac{Lp}{\pi\hbar}-n\right) \\
&= \frac{2\pi\mathrm{i}\hbar}{L}\int\frac{\mathrm{d}p}{2\pi\hbar}\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p^2}{2m}(t_b-t_a)\right\} \\
&\quad \times\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px_a\right\}\sin\frac{px_b}{\hbar}\sum_{n=-\infty}^{+\infty}\delta\left(p-n\frac{\pi\hbar}{L}\right) \\
&= \frac{\mathrm{i}}{L}\sum_{n=-\infty}^{+\infty}\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_n(t_b-t_a)\right\}\exp\{-\mathrm{i}k_nx_a\}\sin k_nx_b,
\end{aligned}
$$

其中, $k_n=\dfrac{\pi n}{L}$, $E_n=\dfrac{\hbar^2k_n^2}{2m}$. 上式中 $n=0$ 的项为零, 因此可进一步组合求和式中正负项得

$$
\begin{aligned}
K_L(x_b,t_b;x_a,t_a) &= \frac{\mathrm{i}}{L}\left(\sum_{n=1}^{+\infty}+\sum_{n=-\infty}^{-1}\right)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_n(t_b-t_a)}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_nx_a}\sin k_nx_b \\
&= \frac{\mathrm{i}}{L}\sum_{n=1}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_n(t_b-t_a)}(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_nx_a}-\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_nx_a})\sin k_nx_b
\end{aligned}
$$

$$=\frac{2}{L}\sum_{n=1}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_n(t_b-t_a)}\sin k_nx_a\sin k_nx_b. \tag{1.111}$$

与 (1.81) 式进行比较, 当 $t=(t_b-t_a)>0$, 对于哈密顿量不显含时间的体系

$$K(x_b,t_b;x_a,t_a)=\sum_n\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_nt}\psi_n(x_b)\psi_n^*(x_a), \tag{1.112}$$

所以, 束缚态能量为

$$E_n=\frac{1}{2m}\hbar^2k_n^2=n^2\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2},\quad n=1,2,\cdots, \tag{1.113}$$

而束缚态波函数为

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{n\pi x}{L},\quad n=1,2,\cdots. \tag{1.114}$$

此结果与通常量子力学中结果一致.

1.6 统计物理与路径积分

1.6.1 配分函数与密度矩阵

统计物理主要研究处于热平衡态的物理体系. 按照正则系综玻尔兹曼分布, 在一定温度 T 下, 体系处于能级为 E 的状态的概率正比于 $\exp\left\{-\frac{E}{kT}\right\}$, 这里 k 是玻尔兹曼常量 ($k=1.38047\times10^{-16}$erg/℃).

决定物理体系热平衡性质的重要函数是配分函数 (partition function)

$$\begin{aligned}Z&=\sum_n\mathrm{e}^{-\frac{E_n}{kT}}=\sum_n\mathrm{e}^{-\beta E_n}\\&=\mathrm{e}^{-\beta F},\quad \beta\equiv\frac{1}{kT}.\end{aligned} \tag{1.115}$$

其中, F 称为体系的自由能, 满足

$$F=-kT\ln Z. \tag{1.116}$$

体系处于能级 E_n 的相对概率为

$$p_n=\frac{\mathrm{e}^{-\beta E_n}}{Z}=\mathrm{e}^{-\beta(E_n-F)}. \tag{1.117}$$

对于大热源接触 (维持体系恒温) 的封闭体系 (不对外做功), 自由能 $F=F(T,V)$ 是决定体系热力学性质的特性函数, 由它可得体系的其他宏观物理量, 例如, 体系的内能为

$$\begin{aligned}U &= \sum_n p_n E_n = \frac{1}{Z}\sum_n E_n \mathrm{e}^{-\beta E_n} \\ &= \sum_n E_n \mathrm{e}^{-\beta(E_n - F)},\end{aligned}$$

而

$$\sum_n E_n \mathrm{e}^{-\beta E_n} = -\frac{\partial Z}{\partial \beta} = kT^2 \frac{\partial Z}{\partial T}, \tag{1.118}$$

因此, 内能为

$$U = \frac{kT^2}{Z}\frac{\partial Z}{\partial T} = kT^2 \frac{\partial \ln Z}{\partial T} = F - T\frac{\partial F}{\partial T} = F + TS, \tag{1.119}$$

其中, $S = -\dfrac{\partial F}{\partial T}$ 称为熵. 封闭体系的基本热力学公式为

$$\mathrm{d}F = \frac{\partial F}{\partial T}\mathrm{d}T + \frac{\partial F}{\partial V}\mathrm{d}V = -S\mathrm{d}T - P\mathrm{d}V.$$

用 $\hat{A}$ 代表体系某物理性质的力学量算符, 它在态 ψ_n 的平均值 (期待值) 为

$$A_n = \int \psi_n^* \hat{A} \psi_n \mathrm{d}V. \tag{1.120}$$

因此, 整个体系的统计平均值为

$$\begin{aligned}\bar{A} &= \sum_n p_n A_n = \frac{1}{Z}\sum_n A_n \mathrm{e}^{-\beta E_n} \\ &= \frac{1}{Z}\sum_n \int \psi_n^*(x)\hat{A}\psi_n(x)\mathrm{e}^{-\beta E_n}\mathrm{d}x.\end{aligned} \tag{1.121}$$

体系热平衡态的确定有时要求要有比配分函数更多信息. 例如, 对于位形空间的体系, 找到体系在 x 处的概率为

$$p(x) = \frac{1}{Z}\psi_n^*(x)\psi_n(x)\mathrm{e}^{-\beta E_n}, \tag{1.122}$$

其中, $\psi_n^*(x)\psi_n(x) = |\psi_n(x)|^2$ 为粒子处于 $\psi_n(x)$ 纯态时找到 x 的概率, 而 $p(x)$ 为对所有可能态的平均概率. 引入密度矩阵 (density matrix)

$$\rho(x', x) = \sum_n \psi_n(x')\psi_n^*(x)\mathrm{e}^{-\beta E_n} = \langle x' | \mathrm{e}^{-\beta \hat{H}} | x \rangle \tag{1.123}$$

设算子 $\hat{A}$ 仅作用在 $\psi_n(x')$ 上, 而不作用在 $\psi_n^*(x)$ 上, 记为 $A\rho(x', x)$, 然后再令 x' 等于 x, 并对 x 的所有值求积分, 此过程相当于对 $A\rho$ 取迹. 这时 (1.121) 式可表示为

$$\bar{A} = \frac{\mathrm{tr}\,[A\rho]}{\mathrm{tr}[\rho]}, \tag{1.124}$$

其中,

$$\mathrm{tr}\,[\rho] = \int \rho(x,x)\mathrm{d}x = Z = \int \mathrm{d}x\,\langle x|\,\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}\,|x\rangle = \mathrm{tr}(\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}). \tag{1.125}$$

在统计力学中, 对一般问题的处理就是用 (1.123) 式计算密度矩阵, 并进一步取迹如 (1.125) 式得统计配分函数.

1.6.2 统计配分函数的路径积分表述

1.5 节曾指出费恩曼传播函数在能量表象的一般表达式为

$$K(x_b,t;x_a,0) = \langle x_b|\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}t}|x_a\rangle = \sum_n \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_n t}\psi_n(x_b)\psi_n^*(x_a), \quad t>0, \tag{1.126}$$

将 (1.126) 式与 (1.105) 式比较, 相当于对时间作 Wick 转动 (Wick rotation)

$$t \to -\mathrm{i}\beta. \tag{1.127}$$

因此, 对于统计物理中的密度矩阵, 可以类似于费恩曼传播函数作路径积分演算, 下面我们给出统计配分函数的路径积分形式.

当体系处在热平衡态, 温度 T 固定, $\beta = \dfrac{1}{kT}$ 为固定参量, 引入小参量 $\delta = \dfrac{\beta}{N}$, 则密度矩阵

$$\begin{aligned}
\rho(x',x) &= \langle x'|\,\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}\,|x\rangle \quad (\beta = N\delta)\\
&= \lim_{N\to\infty,\delta\to 0}\int \prod_{j=1}^{N-1}\mathrm{d}x_j\,\langle x'|\,\mathrm{e}^{-\delta\hat{H}}\,|x_{N-1}\rangle\\
&\quad\times\langle x_{N-1}|\,\mathrm{e}^{-\delta\hat{H}}\,|x_{N-2}\rangle\cdots\langle x_1|\,\mathrm{e}^{-\delta\hat{H}}\,|x\rangle\\
&= \lim_{N\to\infty,\delta\to 0}\int \prod_{j=1}^{N-1}\mathrm{d}x_j\prod_{j=0}^{N-1}\frac{\mathrm{d}p_j}{2\pi\hbar}\\
&\quad\times\exp\left\{\delta\sum_{j=0}^{N-1}\left[\frac{\mathrm{i}}{\delta\hbar}p_j(x_{j+1}-x_j)-H(p_j,x_j)\right]\right\}.
\end{aligned} \tag{1.128}$$

注意到体系的"短时"传播函数

$$\begin{aligned}
&\langle x_{j+1}|\,\mathrm{e}^{-\delta\hat{H}}\,|x_j\rangle\\
&= \langle x_{j+1}|\,\mathrm{e}^{-\delta(\frac{\hat{P}^2}{2m}+\hat{V}(x))}\,|x_j\rangle\\
&= \int \mathrm{d}p\,\langle x_{j+1}|\,\mathrm{e}^{-\delta\frac{\hat{P}^2}{2m}}\,|p\rangle\,\langle p|\,\mathrm{e}^{-\delta\hat{V}(x)}\,|x_j\rangle\,(1+O(\delta^2))
\end{aligned}$$

$$
=\frac{1}{2\pi\hbar}\int \mathrm{d}p\exp\left\{-\delta\frac{p^2}{2m}+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p(x_{j+1}-x_j)\right\}\mathrm{e}^{-\delta V(x_j)}(1+O(\delta^2))
$$

$$
=\frac{1}{2\pi\hbar}\left(\frac{2m\pi}{\delta}\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left\{-\delta\left[\frac{m}{2\hbar^2\delta^2}(x_{j+1}-x_j)^2+V(x_j)\right]\right\}(1+O(\delta^2)),\qquad(1.129)
$$

则 (1.128) 式变为

$$
\rho(x',x)\qquad(1.130)
$$

$$
=\lim_{N\to\infty,\delta\to 0}\int\prod_{j=1}^{N-1}\mathrm{d}x_j\prod_{j=0}^{N-1}\frac{\mathrm{d}p_j}{2\pi\hbar}\exp\left\{-\frac{\Delta\tau}{\hbar}\sum_{j=0}^{N-1}\left[H(p(\tau_j),x(\tau_j))-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p(\tau_j)\dot{x}(\tau_j)\right]\right\}
$$

$$
=\int_{x(0)=x}^{x(\beta)=x'}\mathrm{D}'x\int\frac{\mathrm{D}p}{2\pi\hbar}\exp\left\{-\int_0^\beta \mathrm{d}\tau\,[H(p,x)-\mathrm{i}p\dot{x}]\right\}.\qquad(1.131)
$$

因为 $[\delta]=[\Delta\tau]$ 为时间量纲, 而 (1.130) 式中 $\dot{x}=\lim\limits_{\Delta\tau\to 0}\frac{\Delta x}{\Delta\tau}$, $\Delta\tau$ 为虚时间, 需要再将时间延拓成虚时间, 从而使物理的闵氏空间延拓为实欧空间. 再次利用 (1.129) 式得

$$
\rho(x',x)=\lim_{N\to\infty,\Delta\tau\to 0}\left(\frac{m}{2\pi\hbar\Delta\tau}\right)^{\frac{N}{2}}\int\prod_{j=1}^{N-1}\mathrm{d}x_j
$$

$$
\times\exp\left\{-\Delta\tau\sum_{j=0}^{N-1}\left[\frac{m}{2}\left(\frac{x_{j+1}-x_j}{\Delta\tau}\right)^2+V(x_j)\right]\right\}
$$

$$
=\mathcal{N}\int_x^{x'}\mathrm{D}'x(\tau)\exp\left\{-\int\mathrm{d}\tau\left(\frac{m\dot{x}^2}{2}+V(x)\right)\right\},\qquad(1.132)
$$

于是, 统计配分函数可写为路径积分形式

$$
Z(\beta)=\mathrm{tr}(\exp\{-\beta\hat{H}\})=\int\mathrm{d}x\,\langle x|\exp\{-\beta\hat{H}\}|x\rangle
$$

$$
=\int\mathrm{d}x\int_{x(0)=x}^{x(\beta)=x}\mathrm{D}'x\int\frac{\mathrm{D}p}{2\pi\hbar}\exp\left\{-\int_0^\beta\mathrm{d}\tau\,[H(p,x)-\mathrm{i}p\dot{x}]\right\}
$$

$$
=\int_{x(0)=x(\beta)}\mathrm{D}x(\tau)\exp\left\{-\int_0^\beta\mathrm{d}\tau\left[\frac{1}{2}m\dot{x}^2(\tau)+V(x(\tau))\right]\right\}.\qquad(1.133)
$$

若在 (1.132) 式中将虚时路径积分中 τ 代换为 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}t$, 由于当 $-\frac{\pi}{2}<\theta<\frac{\pi}{2}$ 时, 积分总是收敛的, 因此可解析延拓至 $\tau=\mathrm{i}t$(Wick 转动) 使其变为实时路径积分. 另外

还须注意：(1.132) 式中 $x(0)=x(\beta)$，因而上面积分中仅周期轨道有贡献，且周期为 β(KMS 条件)，所有经 Wick 转动后的观测量期待值均以 β 为周期.

习 题 1

1. 请证明

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}y\mathrm{e}^{-ay^2}=\sqrt{\frac{\pi}{a}}.$$

请证明

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}y\mathrm{e}^{-ay^2+by}=\sqrt{\frac{\pi}{a}}\mathrm{e}^{\frac{b^2}{4a}},$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}y\mathrm{e}^{-ay^2-\frac{c}{y^2}}=\sqrt{\frac{\pi}{a}}\mathrm{e}^{-2\sqrt{ac}}.$$

并利用上面公式计算

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}yy\mathrm{e}^{-ay^2}=?$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}yy\mathrm{e}^{-ay^2+by}=?$$

2. 阶梯函数 $\Theta(\tau)$ 定义为

$$\Theta(\tau)=\begin{cases}1, & \tau>0,\\ 0, & \tau<0.\end{cases}$$

证明阶梯函数 $\Theta(\tau)$ 具有如下积分表达式：

$$\Theta(\tau)=\lim_{\epsilon\to 0}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi\mathrm{i}}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\tau}}{\omega-\mathrm{i}\epsilon},$$

并满足

$$\frac{\partial\Theta(\tau)}{\partial\tau}=\delta(\tau).$$

3. 一维谐振子拉氏量$L=\frac{1}{2}m\dot{x}^2-\frac{1}{2}m\omega^2x^2$，请用费恩曼传播函数路径积分位形空间表达式 (1.62) 式直接计算：一维谐振子的费恩曼传播函数.

4. 求出一维无限深方势阱中粒子的束缚态能级及束缚态波函数.

5. 由一维谐振子费恩曼传播函数表达式

$$\begin{aligned}K(x_b,t_b;x_a,t_a)&=\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\mathrm{i}\hbar\sin\omega T}}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}m\omega}{2\hbar\sin\omega T}\left[\left(x_b^2+x_a^2\right)\cos\omega T-2x_bx_a\right]\right\}\\&=\sum_{n=0}^{\infty}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_nT}\psi_n(x_b)\,\psi_n^*(x_a),\end{aligned}$$

计算一维谐振子的基态及第一激发态的能量及波函数.

第 2 章　平方型拉氏量体系的路径积分

本章将重点研究平方型拉氏量体系中的路径积分理论. 这种体系的拉氏量 L, 一般仅为坐标 $q(t)$ 及速度 $\dot{q}(t)$ 的平方函数, 例如,

$$L = a(t)\dot{q}^2(t) + b(t)q(t)\dot{q}(t) + c(t)q^2(t) + d(t)\dot{q}(t) + e(t)q(t) + f(t). \tag{2.1}$$

(2.1) 式中一般要求$a(t) = \frac{1}{2}m(t)$ 恒正, 以保证体系具有稳定性; 第二项为依赖速度的力项, 相当于有规范场作用; 第三项相当于 $-\omega^2(t)q^2(t)$, 是频率依赖时间的谐振子项; 第四、第五项表明存在外力场. 这种形式的拉氏量概括了很多重要而且精确可解的量子力学体系. 特别是在路径积分理论框架下, 这种体系通常可借助各种高斯积分技术精确求解. 这就为路径积分理论通过明显计算来获得体系精确的物理解提供了很好的一种数学方法, 同时也为研究更复杂的物理体系提供了拓展的依据.

2.1　平方型拉氏量体系路径积分的特点

2.1.1　稳相近似与量子涨落

稳相近似　用路径积分理论处理平方型拉氏量体系时, 可将体系的积分路径 $q(t)$ 看成是经典路径 $q_{\text{cl}}(t)$ 被扰动而变形后的路径. 经典路径满足由拉氏量 L ((2.1) 式) 导出的欧拉–拉格朗日方程

$$\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial L}{\partial q}\right)\bigg|_{q(t)=q_{\text{cl}}(t)} = 0, \tag{2.2}$$

如果用 $x(t)$ 表示相对于经典路径的 $q_{\text{cl}}(t)$ 的扰动, 那么体系的路径可表示为

$$q(t) = q_{\text{cl}}(t) + x(t), \tag{2.3}$$

$$\dot{q}(t) = \dot{q}_{\text{cl}}(t) + \dot{x}(t), \tag{2.4}$$

并要求两端点的取值为

$$q(t_a) = q_{\text{cl}}(t_a) = q_a, \quad x(t_a) = 0, \tag{2.5}$$

$$q(t_b) = q_{\text{cl}}(t_b) = q_b, \quad x(t_b) = 0. \tag{2.6}$$

另一方面, 也可将扰动 $x(t)$ 看成是经典路径周围的涨落, 并称 $x(t)$ 为涨落路径, 显然涨落路径是闭合的.

在平方型拉氏量体系的路径积分理论中, 稳相近似的主要思想是：当量子涨落不很强时, 体系的作用量可近似地分解成两个部分之和, 即体系拉氏量沿经典路径 $q_{\mathrm{cl}}(t)$ 的积分 $S[q_{\mathrm{cl}}(t)]$ 和体系作用量的二次涨落部分 $S_f[x(t)]$, 即

$$S[q(t)] = S[q_{\mathrm{cl}}(t)] + S_f[x(t)]. \tag{2.7}$$

首先可以将体系的拉氏量 $L(q, \dot{q}; t)$ 在经典路径 $q_{\mathrm{cl}}(t)$ 周围作泰勒级数 (Taylor series) 展开, 即

$$\begin{aligned} L(q, \dot{q}; t) = & L(q_c, \dot{q}_c; t) + \left.\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right|_{\mathrm{cl}} \dot{x} + \left.\frac{\partial L}{\partial q}\right|_{\mathrm{cl}} x \\ & + \frac{1}{2}\left.\left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}^2}\dot{x}^2 + 2\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}\partial q}x\dot{x} + \frac{\partial^2 L}{\partial q^2}x^2\right)\right|_{\mathrm{cl}}. \end{aligned} \tag{2.8}$$

因为 L 为平方形式, 故展开到二阶项截止. 所以, 体系的作用量可表示为

$$\begin{aligned} S[q(t)] = & \int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t L(q, \dot{q}; t) \\ = & \int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t L(q_c, \dot{q}_c; t) + \int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t \left(\left.\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right|_{\mathrm{cl}} \dot{x} + \left.\frac{\partial L}{\partial q}\right|_{\mathrm{cl}} x \right) \\ & + \int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t (a(t)\dot{x}^2 + b(t)x\dot{x} + c(t)x^2) \\ = & S[q_{\mathrm{cl}}(t)] + S_1[q_{\mathrm{cl}}(t), x(t)] + S_f[x(t)]. \end{aligned} \tag{2.9}$$

这里, 第一项为

$$S[q_{\mathrm{cl}}(t)] = \int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t L(q_c, \dot{q}_c; t) = S(q_b, t_b; q_a, t_a), \tag{2.10}$$

是体系拉氏量沿经典路径的积分, 正是哈密顿主函数 [见引言 (18) 式]; 第二项为

$$S_1[q_{\mathrm{cl}}(t), x(t)] = \int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t \left(\left.\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right|_{\mathrm{cl}} \dot{x} + \left.\frac{\partial L}{\partial q}\right|_{\mathrm{cl}} x \right) = 0, \tag{2.11}$$

是作用量的一次涨落项, 其贡献为零是因为 $q_c(t)$ 满足欧拉-拉格朗日方程 (“在质壳上”), 利用分部积分即可证明之; 第三项为

$$S_f[x(t)] = \int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t (a(t)\dot{x}^2 + b(t)x\dot{x} + c(t)x^2), \tag{2.12}$$

是作用量的二次涨落项, 它是沿涨落路径 $x(t)$ 的积分. 为方便起见, 将 $S_f[x(t)]$ 称为涨落作用量.

量子涨落因子　平方型拉氏量体系费恩曼传播函数的路径积分表示可写为

$$\begin{aligned}K(q_b,t_b;q_a,t_a)&=\int_{q(t_a)=q_a}^{q(t_b)=q_b}\mathrm{D}q(t)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[q(t)]}\\&=F(t_b,t_a)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S_{\mathrm{cl}}(q_b,t_b;q_a,t_a)},\end{aligned}\tag{2.13}$$

其中,

$$\begin{aligned}F(t_b,t_a)&=\int_{x(t_a)=0}^{x(t_b)=0}\mathrm{D}x(t)\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S_f[x(t)]\right\},\\&=\int_{x(t_a)=0}^{x(t_b)=0}\mathrm{D}x(t)\exp\left\{\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t(a(t)\dot{x}^2+b(t)x\dot{x}+c(t)x^2)\right\}.\end{aligned}\tag{2.14}$$

$F(t_b,t_a)$ 代表着路径积分相对于经典路径的量子涨落, 故被称为量子涨落因子. 在一些著作中也称其为约化路径积分 (reduced path integral), 或约化核 (reduced kernel), 或约化传播函数 (reduced propagator). 因为量子涨落因子不含 q_a,q_b, 仅依赖时间 t_b,t_a, 故记为 $F(t_b,t_a)$. 进一步, 如果系数 a,b,c 也不显含时间, 则量子涨落因子仅与 $t_b-t_a=T$ 有关, 可记为 $F(t_b-t_a)=F(T)$.

注意: 在稳相近似下, 费恩曼传播函数路径积分可表示为相因子 $\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S_{\mathrm{cl}}\right\}$ 与量子涨落因子 $F(t_b,t_a)$ 相乘的形式, 这种近似方法对于平方型拉氏量体系具有普遍性, 但是当势含高次项时, 以上性质被破坏. 此外, 量子涨落因子 $F(t_b,t_a)$ 仅与拉氏量中的二次项有关, 与拉氏量中的线性项无关. 例如, 在外力场中的谐振子, 外力场的存在不影响量子涨落因子 $F(t_b,t_a)$, 而仅对相因子经典作用量 S_{cl} 有影响 (见 2.2 节).

2.1.2　量子涨落因子的傅里叶级数解法

平方型拉氏量体系的量子涨落因子可以用多种方法进行严格计算. 这里先介绍傅里叶级数展开解法.

变量变换　将涨落路径 $x(t)$ 用傅里叶级数展开. 由于 $x(t_a)=0=x(t_b)$, 所以展开式中仅取正弦项, 即

$$x(t)=\sum_{k=1}^{N-1}a_k\sin\frac{k\pi}{T}(t-t_a).\tag{2.15}$$

傅里叶级数解法的主旨是将 $\{a_k\}$看成新积分变量, 使原来被积的中间坐标变量

$$x_j = x(t_j) = \sum_{k=1}^{N-1} a_k \sin\frac{k\pi}{T}(t_j - t_a), \quad j = 1, \cdots, N-1 \tag{2.16}$$

均换为对 a_k 的积分. 由于要将积分路径分为 N 段, 有 $N-1$ 个中间时间点, 即在 (2.15) 式作傅里叶级数展开时仅有 $N-1$ 个独立系数 a_k, 因此这就将量子涨落因子中对 $N-1$ 个 x_j 的积分, 转换为了对 $N-1$ 个 a_k 的积分, 相应的积分测度变换的雅可比行列式为

$$J_N = \det\left[\sin\frac{k\pi}{T}(t_j - t_a)\right], \quad k, j = 1, \cdots, N-1, \tag{2.17}$$

式中, k, j 为矩阵元指标. 此行列式的直接计算结果是繁琐的, 但注意到 $\{x_j\}$ 与 $\{a_k\}$ 之间为线性变换, 因此变换的雅可比行列式与 $\{a_k\}$ 无关, 且不含动力学变量, 仅影响归一化常数.

谐振子体系的涨落计算 下面以一维谐振子为例对量子涨落因子进行分析. 这时, 费恩曼传播函数为

$$K_H(q_b, t_b; q_a, t_a) = F_H(t_b - t_a) \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} S_{\mathrm{cl}}(q_b, t_b; q_a, t_a)\right\}, \tag{2.18}$$

其中, S_{cl} 如 (1.101) 式, 量子涨落因子为

$$F_H(T) = \int_0^0 \mathrm{D}x(t) \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^T \mathrm{d}t \frac{m}{2}(\dot{x}^2 - \omega^2 x^2)\right\}. \tag{2.19}$$

首先将被积的坐标变量作傅里叶级数展开

$$x(t) = \sum_{k=1}^{N-1} a_k \sin\frac{k\pi}{T} t, \tag{2.20}$$

显然满足 $x(0) = x(T) = 0$. 由于

$$\frac{2}{L}\int_0^L \mathrm{d}x \sin\frac{k\pi x}{L} \sin\frac{l\pi x}{L} = \delta_{kl}, \quad k, l \in \mathbb{N}, \tag{2.21}$$

$$\frac{2}{L}\int_0^L \mathrm{d}x \cos\frac{k\pi x}{L} \cos\frac{l\pi x}{L} = \delta_{kl}, \quad k, l \in \mathbb{N}, \tag{2.22}$$

易证

$$\int_0^T \mathrm{d}t x^2(t) = \sum_{k,l=1}^{N-1} \int_0^T \mathrm{d}t a_k a_l \sin\frac{k\pi t}{T} \sin\frac{l\pi t}{T} = \frac{T}{2}\sum_{k=1}^{N-1} a_k^2, \tag{2.23}$$

$$\int_0^T \mathrm{d}t \dot{x}^2(t) = \sum_{k,l=1}^{N-1} \int_0^T \mathrm{d}t a_k a_l \frac{k\pi}{T}\frac{l\pi}{T} \cos\frac{k\pi t}{T} \cos\frac{l\pi t}{T} = \frac{T}{2}\sum_{k=1}^{N-1} a_k^2 \left(\frac{k\pi}{T}\right)^2, \tag{2.24}$$

代入 (2.19) 式得

$$F_H(T) = \left(\frac{mN}{\mathrm{i}2\pi\hbar T}\right)^{\frac{N}{2}} J_N \int \mathrm{d}a_1 \cdots \mathrm{d}a_{N-1} \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{k=1}^{N-1}\frac{m}{4}\left(\frac{k^2\pi^2}{T} - \omega^2 T\right)a_k^2\right\}. \tag{2.25}$$

另一方面, 自由粒子体系的量子涨落因子 (相当于 (2.25) 式中取 $\omega \to 0$) 为

$$\begin{aligned} F_0(T) &= \int_0^0 \mathrm{D}x(t)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^T \mathrm{d}t \frac{m}{2}\dot{x}^2} \\ &= \lim_{N\to\infty}\left(\frac{mN}{\mathrm{i}2\pi\hbar T}\right)^{\frac{N}{2}} J_N \int \mathrm{d}a_1 \cdots \mathrm{d}a_{N-1}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{k=1}^{N-1}\frac{m}{4}\left(\frac{k^2\pi^2}{T}\right)a_k^2\right\}. \end{aligned} \tag{2.26}$$

这样, 将上面 (2.25) 式和 (2.26) 式取比值得

$$\begin{aligned} F_H(T) &= F_0(T)\lim_{N\to\infty}\frac{\displaystyle\int\prod_{k=1}^{N-1}\mathrm{d}a_k\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{k=1}^{N-1}\frac{m}{4}\left(\frac{k^2\pi^2}{T}-\omega^2T\right)a_k^2\right\}}{\displaystyle\int\prod_{k=1}^{N-1}\mathrm{d}a_k\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{k=1}^{N-1}\frac{mk^2\pi^2}{4T}a_k^2\right\}} \\ &= F_0(T)\prod_{k=1}^{\infty}\left(\frac{\dfrac{k^2\pi^2}{T^2}-\omega^2}{\dfrac{k^2\pi^2}{T^2}}\right)^{-\frac{1}{2}} \\ &= F_0(T)\prod_{k=1}^{\infty}\left(1-\frac{\omega^2T^2}{k^2\pi^2}\right)^{-\frac{1}{2}}. \end{aligned} \tag{2.27}$$

利用自由粒子路径积分的直接计算结果 ((1.67) 式), 可得

$$F_0(T) = \left(\frac{m}{\mathrm{i}2\pi\hbar T}\right)^{\frac{1}{2}}. \tag{2.28}$$

再用无穷乘积公式①

$$\prod_{k=1}^{\infty}\left[1-\left(\frac{z}{k\pi}\right)^2\right] = \frac{\sin z}{z}. \tag{2.29}$$

将以上结果代入 (2.27) 式得

$$F_H(T) = \left(\frac{m}{\mathrm{i}2\pi\hbar T}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{\sin\omega T}{\omega T}\right)^{-\frac{1}{2}} = \left(\frac{m\omega}{\mathrm{i}2\pi\hbar\sin\omega T}\right)^{\frac{1}{2}}. \tag{2.30}$$

这与 1.4 节用直接计算所得结果 (1.98) 式完全相同.

① 王竹溪, 郭敦仁. 2000. 特殊函数概论. 北京: 北京大学出版社, 30.

有时需要计算积分测度变换的雅可比行列式 J_N ((2.17) 式), 这可利用对简单体系 (自由粒子) 的相同变换直接计算得到, 即将 (2.28) 式代入 (2.26) 式得

$$\begin{aligned}\left(\frac{m}{\mathrm{i}2\pi\hbar T}\right)^{\frac{1}{2}} &= \lim_{N\to\infty}\left(\frac{mN}{\mathrm{i}2\pi\hbar T}\right)^{\frac{N}{2}} J_N \int\prod_{k=1}^{N-1}\mathrm{d}a_k \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{k=1}^{N-1}\frac{mk^2\pi^2}{4T}a_k^2\right\} \\ &= \lim_{N\to\infty}\left(\frac{mN}{\mathrm{i}2\pi\hbar T}\right)^{\frac{N}{2}} J_N \prod_{k=1}^{N-1}\left[\left(\frac{\mathrm{i}4\pi\hbar T}{m}\right)^{\frac{1}{2}}\frac{1}{k\pi}\right] \\ &= \lim_{N\to\infty} J_N\left(\frac{m}{\mathrm{i}2\pi\hbar T}\right)^{\frac{1}{2}}\frac{N^{N/2}}{(N-1)!\pi^{N-1}}2^{\frac{N-1}{2}}. \end{aligned}\tag{2.31}$$

于是, 对于一维谐振子体系, 由傅里叶变换引起的积分测度变换的雅可比行列式为

$$J_N = 2^{-\frac{N-1}{2}}N^{-\frac{N}{2}}(N-1)!\pi^{N-1}.\tag{2.32}$$

2.1.3 谐振子路径积分的矩阵解法

本节将介绍另一种计算量子涨落因子的新方法, 即矩阵方法. 为简单起见, 仍以一维谐振子体系为例. 正如 2.1.2 节所指出的那样, 将路径看成是相对于经典路径的扰动, 这一思想在路径积分理论中具有深刻的意义. 在这种思想下, 体系的费恩曼传播函数被分解为两个因子的乘积, 即由经典路径完全确定的相因子 $\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S_{\mathrm{cl}}\right\}$ 与相对于经典路径的量子涨落因子 $F(t_b,t_a)$ 之积. 由于前一因子相对容易计算, 因此对量子涨落因子, $F(t_b,t_a)$ 的计算就变得尤为重要.

量子涨落因子的矩阵表述 一维谐振子的量子涨落因子为

$$\begin{aligned}F(t_b-t_a) &= \int_{x(t_a)=0}^{x(t_b)=0}\mathrm{D}x(t)\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{2\hbar}\int_{t_a}^{t_b}(m\dot{x}^2-m\omega^2x^2)\mathrm{d}t\right\} \\ &= \lim_{\substack{N\to\infty\\ \epsilon\to0}}\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\epsilon}\right)^{\frac{N}{2}}\left[\prod_{j=1}^{N-1}\int\mathrm{d}x_j\right] \\ &\quad\times\exp\left\{\frac{\mathrm{i}\epsilon}{\hbar}\frac{m}{2}\sum_{j=1}^{N}\left[\frac{(x_j-x_{j-1})^2}{\epsilon^2}-\omega^2\frac{(x_j+x_{j-1})^2}{4}\right]\right\}.\end{aligned}$$

由于边界条件: $x(t_a)=x(t_b)=0$, 可以令 $x_0=x_N=0$. 下面为了计算简化, 将积分变量重新标度, 即令

$$\eta_j = \left(\frac{m}{2\hbar\epsilon}\right)^{1/2}x_j,$$

则

$$
\begin{aligned}
F(t_b-t_a)=&\lim_{\substack{N\to\infty\\ \epsilon\to 0}}\left(\frac{m}{2\pi \mathrm{i}\hbar\epsilon}\right)^{\frac{N}{2}}\left(\frac{2\hbar\epsilon}{m}\right)^{\frac{N-1}{2}}\left[\prod_{j=1}^{N-1}\int \mathrm{d}\eta_j\right]\\
&\times\exp\left\{\mathrm{i}\sum_{j=1}^{N}\left[(\eta_j-\eta_{j-1})^2-\epsilon^2\omega^2\frac{(\eta_j+\eta_{j-1})^2}{4}\right]\right\}\\
=&\lim_{\substack{N\to\infty\\ \epsilon\to 0}}\left(\frac{m}{2\pi \mathrm{i}\hbar\epsilon}\right)^{\frac{N}{2}}\left(\frac{2\hbar\epsilon}{m}\right)^{\frac{N-1}{2}}\int \mathrm{d}\boldsymbol{\eta}\exp\{\mathrm{i}\eta^t\boldsymbol{B}\boldsymbol{\eta}\}.
\end{aligned}
\tag{2.33}
$$

这里, 将新的积分变量 $\{\eta_j, j=1,2,\cdots,N-1\}$ 排成列矩阵 $(\eta_0=\eta_N=0)$

$$
\boldsymbol{\eta}=\begin{pmatrix}\eta_1\\ \eta_2\\ \vdots\\ \eta_{N-1}\end{pmatrix},
$$

而 $(N-1)\times(N-1)$ 的方阵 $\boldsymbol{B}$(称为涨落矩阵) 具有对角三线性形式, 即

$$
\boldsymbol{B}=\begin{pmatrix}2&-1&0&0&\cdots\\ -1&2&-1&0&\cdots\\ 0&-1&2&-1&\cdots\\ \vdots&\vdots&\vdots&\vdots&\end{pmatrix}-\frac{\omega^2\epsilon^2}{4}\begin{pmatrix}2&1&0&0&\cdots\\ 1&2&1&0&\cdots\\ 0&1&2&1&\cdots\\ \vdots&\vdots&\vdots&\vdots&\end{pmatrix}.
\tag{2.34}
$$

显然, $\boldsymbol{B}$ 为对称厄米矩阵, 可用幺正矩阵 $\boldsymbol{u}$ 相似变换为对角形式, 即

$$
\boldsymbol{\zeta}=\boldsymbol{u}\boldsymbol{\eta},\quad \boldsymbol{B}_{D}=\boldsymbol{u}\boldsymbol{B}\boldsymbol{u}^{-1}=\begin{pmatrix}b_1&0&0&\cdots&0\\ 0&b_2&0&\cdots&0\\ 0&0&b_3&\cdots&0\\ 0&0&0&\cdots&0\\ 0&0&0&\cdots&0\\ 0&0&0&\cdots&b_{n-1}\end{pmatrix}.
$$

积分变量变换是用幺正矩阵 $\boldsymbol{u}$ 变换, 所以测度变换的雅可比行列式为 1, 故

$$
\begin{aligned}
\int \mathrm{d}\boldsymbol{\eta}\exp\{\mathrm{i}\boldsymbol{\eta}^t\boldsymbol{B}\boldsymbol{\eta}\}&=\int \mathrm{d}\boldsymbol{\zeta}\exp\{\mathrm{i}\boldsymbol{\zeta}^t\boldsymbol{B}_D\boldsymbol{\zeta}\}=\int \mathrm{d}\zeta_1\cdots\mathrm{d}\zeta_{N-1}\exp\left\{\mathrm{i}\sum_{j=1}^{N-1}b_j\zeta_j^2\right\}\\
&=\prod_{j=1}^{N-1}\left(\frac{\mathrm{i}\pi}{b_j}\right)^{\frac{1}{2}}=(\mathrm{i}\pi)^{\frac{N-1}{2}}(\det\boldsymbol{B})^{-\frac{1}{2}},
\end{aligned}
$$

代入 (2.33) 式得

$$F\left(t_a-t_b\right)=\lim_{\substack{N\to\infty\\ \epsilon\to 0}}\left(\frac{m}{2\mathrm{i}\pi\hbar\epsilon}\right)^{\frac{N}{2}}\left(\frac{2\hbar\epsilon}{m}\right)^{\frac{N-1}{2}}(\mathrm{i}\pi)^{\frac{N-1}{2}}(\det\boldsymbol{B})^{-\frac{1}{2}}$$

$$=\lim_{\substack{N\to\infty\\ \epsilon\to 0}}\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\epsilon\det\boldsymbol{B}}\right)^{\frac{1}{2}},\tag{2.35}$$

即量子涨落因子由涨落矩阵行列式 $\det\boldsymbol{B}$ 决定.

涨落矩阵行列式的计算 从上面的分析, 可以看出只有当涨落矩阵 $\boldsymbol{B}$ 所有的本征值都不为零时, 费恩曼传播函数才不会有奇异. 所以下面主要计算 $\lim\limits_{\substack{N\to\infty\\ \epsilon\to 0}}\epsilon\det\boldsymbol{B}$. 注意到涨落矩阵 $\boldsymbol{B}$ 为主对角三线形式, 即

$$\boldsymbol{B}=\begin{pmatrix}\alpha&\beta&0&0&\cdots\\ \beta&\alpha&\beta&0&\cdots\\ 0&\beta&\alpha&\beta&\cdots\\ \vdots&\vdots&\vdots&\vdots&\end{pmatrix},\tag{2.36}$$

$$\alpha=2\left(1-\frac{\epsilon^2\omega^2}{4}\right),\quad \beta=-\left(1+\frac{\epsilon^2\omega^2}{4}\right).$$

将 $\boldsymbol{B}$ 的右下主 j 子式记为 D_j, 则易证

$$D_{j+1}=\alpha D_j-\beta^2 D_{j-1},\quad j=0,1,2,3,\cdots\tag{2.37}$$

其中, $D_{-1}=0,\ D_0=1,\ D_1=\alpha$. 也可将这一循环关系记为

$$\begin{pmatrix}D_{j+1}\\ D_j\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\alpha&-\beta^2\\ 1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}D_j\\ D_{j-1}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\alpha&-\beta^2\\ 1&0\end{pmatrix}^2\begin{pmatrix}D_{j-1}\\ D_{j-2}\end{pmatrix}=\cdots,$$

所以,

$$\begin{pmatrix}D_{N-1}\\ D_{N-2}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\alpha&-\beta^2\\ 1&0\end{pmatrix}^{N-2}\begin{pmatrix}D_1=\alpha\\ D_0=1\end{pmatrix}.$$

很容易算出其中每一 2×2 方阵的本征值 $\lambda_\pm$, 即

$$\det\begin{vmatrix}\alpha-\lambda&-\beta^2\\ 1&-\lambda\end{vmatrix}=-(\alpha-\lambda)\lambda+\beta^2=\lambda^2-\alpha\lambda+\beta^2=0\tag{2.38}$$

所以,

$$\lambda_\pm=\frac{\alpha\pm\sqrt{\alpha^2-4\beta^2}}{2}.\tag{2.39}$$

又因为 2×2 方阵可用相似幺正矩阵对角化

$$\begin{pmatrix} \alpha & -\beta^2 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \boldsymbol{S} \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix} \boldsymbol{S}^{-1},$$

其中,

$$\boldsymbol{S} = \begin{pmatrix} \lambda_+ & \lambda_- \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{S}^{-1} = \frac{1}{\lambda_+ - \lambda_-} \begin{pmatrix} 1 & -\lambda_- \\ -1 & \lambda_+ \end{pmatrix}. \tag{2.40}$$

所以,

$$\begin{aligned}
&\begin{pmatrix} D_{N-1} \\ D_{N-2} \end{pmatrix} \\
&= \boldsymbol{S} \begin{pmatrix} \lambda_+^{N-2} & 0 \\ 0 & \lambda_-^{N-2} \end{pmatrix} \boldsymbol{S}^{-1} \begin{pmatrix} \lambda_+ + \lambda_- \\ 1 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \lambda_+ & \lambda_- \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_+^{N-2} & 0 \\ 0 & \lambda_-^{N-2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -\lambda_- \\ -1 & \lambda_+ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_+ + \lambda_- \\ 1 \end{pmatrix} \frac{1}{\lambda_+ - \lambda_-} \\
&= \frac{1}{\lambda_+ - \lambda_-} \begin{pmatrix} \lambda_+^N - \lambda_-^N \\ \lambda_+^{N-1} - \lambda_-^{N-1} \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

因此, 可得

$$D_{N-1} = \frac{\lambda_+^N - \lambda_-^N}{\lambda_+ - \lambda_-}, \tag{2.41}$$

且容易验证

$$D_{-1} = 0, \quad D_0 = 1, \quad D_1 = \lambda_+ + \lambda_- = \alpha.$$

这样再由 (2.39) 式得

$$\begin{aligned}
\lambda_+ - \lambda_- &= \sqrt{\alpha^2 - 4\beta^2} = 2\left[\left(1 - \frac{\epsilon^2\omega^2}{4}\right)^2 - \left(1 + \frac{\epsilon^2\omega^2}{4}\right)^2\right]^{\frac{1}{2}} \\
&= (-4\epsilon^2\omega^2)^{\frac{1}{2}} = 2\mathrm{i}\epsilon\omega, \\
\lambda_+^N &= \left[\left(1 - \frac{\epsilon^2\omega^2}{4}\right) + \mathrm{i}\epsilon\omega\right]^N = \left[1 + \mathrm{i}\epsilon\omega + O\left(\epsilon^2\right)\right]^N, \\
\lambda_-^N &= \left[\left(1 - \frac{\epsilon^2\omega^2}{4}\right) - \mathrm{i}\epsilon\omega\right]^N = \left[1 - \mathrm{i}\epsilon\omega + O\left(\epsilon^2\right)\right]^N,
\end{aligned} \tag{2.42}$$

最终可得

$$\begin{aligned}\lim_{\substack{N\to\infty\\ \epsilon\to 0}}\epsilon\det\boldsymbol{B} &= \lim_{\substack{N\to\infty\\ \epsilon\to 0}}\epsilon D_{N-1} = \lim_{\substack{N\to\infty\\ \epsilon\to 0}}\epsilon\frac{1}{2\mathrm{i}\epsilon\omega}\left[(1+\mathrm{i}\epsilon\omega)^N-(1-\mathrm{i}\epsilon\omega)^N\right]\\ &= \lim_{\substack{N\to\infty\\ \epsilon\to 0}}\epsilon\frac{1}{2\mathrm{i}\epsilon\omega}\left[\left(1+\frac{\mathrm{i}\omega T}{N}\right)^N-\left(1-\frac{\mathrm{i}\omega T}{N}\right)^N\right]\\ &= \frac{1}{2\mathrm{i}\omega}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega T}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega T}\right)=\frac{\sin\omega T}{\omega},\end{aligned}$$

此式代入 (2.35) 式得到

$$F(t_b-t_a)=\left(\frac{m\omega}{2\pi\mathrm{i}\hbar\sin\omega T}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{2.43}$$

这与前面用傅里叶变换方法计算一维谐振子约化路径积分的结果 (1.98) 式完全相同.

2.2 强迫谐振子

2.2.1 哈密顿主函数及其格林函数解法

2.1 节中曾指出, 对于外场中的谐振子费恩曼传播函数, 外力场的存在不影响量子涨落因子 $F(t_b-t_a)$, 仅影响相因子 $S_{\rm cl}=S[x_{\rm cl}(t)]$. 2.1 节中曾认真分析了无外场时谐振子的量子涨落因子 $F(t_b-t_a)$ 的计算. 本节以外场中的谐振子为例, 详细讨论相因子 $\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[q_{\rm cl}(t)]\right\}$, 这样便可获得关于整个费恩曼传播函数表达式.

外场中的经典轨迹 在外场中的谐振子拉氏量为

$$L(x(t),\dot{x}(t);t)=\frac{1}{2}m\dot{x}^2-\frac{1}{2}m\omega^2x^2+J(t)\,x. \tag{2.44}$$

这里假定谐振子本身具有电荷, 而外源 $J(t)$ 相当于外电场. 相应的经典欧拉–拉格朗日方程

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}+\omega^2\right)x=\frac{J(t)}{m} \tag{2.45}$$

为 x 的非齐次方程. 方程的齐次部分具有通解, 即

$$x_H(t)=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}+A'\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}. \tag{2.46}$$

而非齐次部分的特解 x_P 可通过引入满足方程

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}+\omega^2\right)G(t-t')=-\delta(t-t'), \tag{2.47}$$

的格林函数 $G(t-t')$ 来获得, 即如能找到满足 (2.47) 式的格林函数, 则 (2.45) 式的解可以表示为

$$x_{\mathrm{cl}}(t)=x_H(t)-\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t'G(t-t')\frac{J(t')}{m}=x_H(t)+x_I(t). \tag{2.48}$$

费恩曼因果格林函数　下面求解格林函数. 首先对 (2.47) 式作傅里叶变换

$$G(t-t')=\int\frac{\mathrm{d}k}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(t-t')}\mathcal{G}(k), \tag{2.49}$$

$$\delta(t-t')=\int\frac{\mathrm{d}k}{2\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(t-t')}, \tag{2.50}$$

即在 k 空间中 (2.47) 式可表示为

$$\left(-k^2+\omega^2\right)\frac{\mathcal{G}(k)}{\sqrt{2\pi}}=-\frac{1}{2\pi}, \tag{2.51}$$

所以,

$$\mathcal{G}(k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\frac{1}{k^2-\omega^2}. \tag{2.52}$$

代入 (2.49) 式, 则求得格林函数

$$G(t-t')=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}k}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(t-t')}\mathcal{G}(k)=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}k}{2\pi}\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(t-t')}}{k^2-\omega^2} \tag{2.53}$$

当 (2.53) 式沿实 k 轴积分时, 实轴上具有极点, 位置在 $k=\pm\omega$ 处. 应设法正则化, 即先将极点移离实轴小量 $\mathrm{i}\epsilon$, 等计算出结果后再令 $\epsilon\to 0$. 通常有三种不同的选择, 相应地得到三种格林函数, 即

推迟格林函数 (图 2.1):

$$\mathcal{G}_R(k)=\lim_{\epsilon\to 0^+}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\frac{1}{(k+\mathrm{i}\epsilon)^2-\omega^2},$$

Imk　$-\omega-\mathrm{i}\epsilon$　O　$\omega-\mathrm{i}\epsilon$　Rek

图 2.1

超前格林函数 (图 2.2)：

$$\mathcal{G}_R(k) = \lim_{\epsilon\to 0^+} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{(k-\mathrm{i}\epsilon)^2 - \omega^2}.$$

图 2.2

和费恩曼因果格林函数 (Causal Green function)(图 2.3)：

$$\mathcal{G}_F(k) = \lim_{\epsilon\to 0^+} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{k^2 - \omega^2 + \mathrm{i}\epsilon}.$$

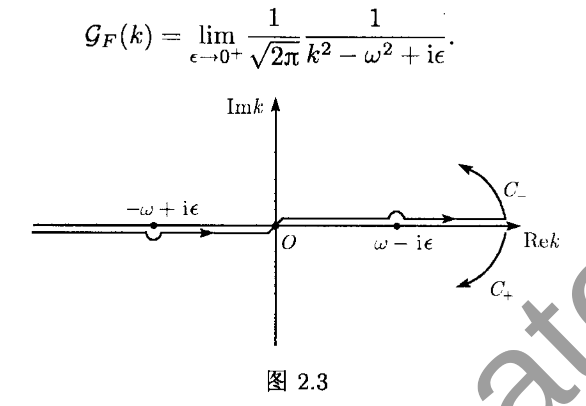


图 2.3

究竟采用哪种格林函数, 需要做一下判断. 事实上, 外场中谐振子的费恩曼传播函数为

$$\begin{aligned} K_J(x_b, t_b; x_a, t_a) &= \int \mathrm{D}x[t] \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} S^J[x(t)]\right\} \\ &= \int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} \mathrm{D}x[t] \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t \left(\frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + J(t)x(t)\right)\right\}, \end{aligned}$$

上式中的被积函数为振荡项, 为恢复收敛性可加衰减项

$$-\frac{1}{2}\int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t x^2(t), \quad \epsilon > 0, \tag{2.54}$$

等计算出结果后再令 $\epsilon \to 0$. 这时被积函数改为

$$\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t \left[\frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}m(\omega^2 - \mathrm{i}\epsilon)x^2 + J(t)x(t)\right]\right\}. \tag{2.55}$$

由上面分析看出, 应采用费恩曼因果格林函数, 即

$$
\begin{aligned}
G_F(t-t') &= \lim_{\epsilon\to 0^+}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}k}{2\pi}\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(t-t')}}{k^2-\omega^2+\mathrm{i}\epsilon} \\
&= \lim_{\delta\to 0^+}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}k}{2\pi}\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(t-t')}}{(k+\omega-\mathrm{i}\delta)(k-\omega+\mathrm{i}\delta)},\quad \delta=\frac{\epsilon}{2\omega}.
\end{aligned}
\tag{2.56}
$$

此外, 为了在复分析中计算出上式的积分值, 还需设法补上在复平面上无穷远处回路, 使其成为闭合回路后再计算出闭合回路内极点的留数值. 一般情况下, 当 $t-t'\geqslant 0$, 可增加在下半平面回路 C_+ 的积分, 而当 $t-t'\leqslant 0$, 则可增加沿上半平面回路 C_- 的积分. 这样两种选择, 无穷远回路 C_+ 和 C_- 的贡献均为零. 按此约定, 计算闭合回路内极点留数值可得

$$
G_F(t-t') = \frac{1}{2\mathrm{i}\omega}\left(\Theta(t-t')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')}+\Theta(t'-t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega(t-t')}\right). \tag{2.57}
$$

经典路径的计算　将 (2.57) 式结果代入 (2.48) 式, 可获得经典路径

$$
\begin{aligned}
x_{cl}(t) &= x_H(t) - \int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t' G_F(t-t')\frac{J(t')}{m} \\
&= A\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} + A'\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} - \frac{1}{2\mathrm{i}m\omega}\left[\int_{t_a}^{t}\mathrm{d}t'\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')}J(t')\right. \\
&\quad \left. + \int_{t}^{t_b}\mathrm{d}t'\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega(t-t')}J(t')\right].
\end{aligned}
\tag{2.58}
$$

再利用边界条件

$$
x_{cl}(t_b) = x_b = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t_b} + A'\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t_b} - \frac{1}{2\mathrm{i}m\omega}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t'\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t_b-t')}J(t'),
$$

$$
x_{cl}(t_a) = x_a = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t_a} + A'\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t_a} - \frac{1}{2\mathrm{i}m\omega}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t'\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega(t_a-t')}J(t').
$$

可解出待定常数 A 与 A', 即

$$
x_b\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t_a} = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega(t_b-t_a)} + A'\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t_b+t_a)} - \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t_a}}{2\mathrm{i}m\omega}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t'\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t_b-t')}J(t'),
$$

$$
x_a\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t_b} = A\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t_b-t_a)} + A'\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t_b+t_a)} - \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t_b}}{2\mathrm{i}m\omega}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t'\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega(t_a-t')}J(t').
$$

上面两式相减可得

$$
x_b\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t_a} - x_a\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t_b} = 2A\mathrm{i}\sin\omega(t_b-t_a) - \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t_b}}{m\omega}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t'\sin\omega(t'-t_a)J(t').
$$

所以

$$A=\frac{1}{2\mathrm{i}\sin\omega\left(t_b-t_a\right)}\left[x_b\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t_a}-x_a\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t_b}+\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t_b}}{m\omega}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t'\sin\omega\left(t'-t_a\right)J\left(t'\right)\right],$$

类似可得

$$A'=\frac{1}{2\mathrm{i}\sin\omega\left(t_b-t_a\right)}\left[x_a\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t_b}-x_b\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t_a}+\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t_a}}{m\omega}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t'\sin\omega\left(t_b-t'\right)J\left(t'\right)\right].$$

将以上结果代入 (2.58) 式得出经典路径的最终结果为

$$\begin{aligned}x_{cl}(t)=&\frac{1}{\sin\omega\left(t_b-t_a\right)}\Bigg\{x_b\sin\omega(t-t_a)+x_a\sin\omega(t_b-t)\\&+\frac{1}{2m\omega}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t'J(t')\left[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t_b-t_a)}\cos\omega(t-t')-\cos\omega(t_a+t_b-t-t')\right]\Bigg\}\\&-\frac{1}{2\mathrm{i}m\omega}\left[\int_{t_a}^{t}\mathrm{d}t'\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')}J(t')+\int_{t}^{t_b}\mathrm{d}t'\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega(t-t')}J(t')\right].\end{aligned}\tag{2.59}$$

哈密顿主函数 这样, 强迫谐振子的经典哈密顿主函数为

$$\begin{aligned}S^J\left[x_{\mathrm{cl}}\left(t\right)\right]=&\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\left(\frac{1}{2}m\dot{x}_{\mathrm{cl}}(t)^2-\frac{1}{2}m\omega^2x_{\mathrm{cl}}(t)^2+J(t)x_{\mathrm{cl}}(t)\right)\\=&\frac{1}{2}mx_{\mathrm{cl}}(t)\dot{x}_{\mathrm{cl}}(t)|_{t_a}^{t_b}-\frac{1}{2}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}tx_{\mathrm{cl}}(t)\left(m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}+m\omega^2\right)x_{\mathrm{cl}}(t)\\&+\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}tJ(t)x_{\mathrm{cl}}(t)\\=&\frac{m}{2}(x_b\dot{x}_{\mathrm{cl}}(t_b)-x_a\dot{x}_{\mathrm{cl}}(t_a))+\frac{1}{2}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}tJ(t)x_{\mathrm{cl}}(t),\end{aligned}\tag{2.60}$$

再将 (2.59) 式代入 (2.60) 式得

$$\begin{aligned}&S^J[x_{\mathrm{cl}}(t)]\\=&\frac{m\omega}{2\sin\omega\left(t_b-t_a\right)}\left[(x_b^2+x_a^2)\cos\omega\left(t_b-t_a\right)-2x_bx_a\right]\\&+\frac{1}{\sin\omega\left(t_b-t_a\right)}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}tJ(t)[x_b\sin\omega(t-t_a)+x_a\sin\omega(t_b-t)]\\&-\frac{1}{m\omega\sin\omega(t_b-t_a)}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\int_{t_a}^{t}\mathrm{d}t'J(t)\sin\omega(t_b-t)\sin\omega(t'-t_a)J(t').\end{aligned}\tag{2.61}$$

则在外力场中谐振子的费恩曼传播函数为

$$K_J(x_b,t_b;x_a,t_a)=\left(\frac{m\omega}{2\pi\mathrm{i}\hbar\sin\omega(t_b-t_a)}\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S^J[x_{\mathrm{cl}}(t)]\right). \tag{2.62}$$

2.2.2 外场中谐振子的量子配分函数

为分析外场中一维谐振子能谱结构, 需要计算在外场中谐振子的量子配分函数, 即

$$\begin{aligned}&Z_J(T)\\&=\int\mathrm{d}xK_J\left(x,\frac{T}{2};x,-\frac{T}{2}\right)\\&=\int_{x(t_a)=x(t_b)}\mathrm{D}x(t)\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}}\mathrm{d}t\left(\frac{1}{2}m\dot{x}^2-\frac{1}{2}m\omega^2x^2+J(t)x(t)\right)\right\},\end{aligned} \tag{2.63}$$

(2.63) 式中被积函数仍然为振荡项, 为恢复收敛性, 加入衰减项

$$-\frac{1}{2}\epsilon\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}}\mathrm{d}t\ m\ x^2(t),\quad \epsilon>0 \tag{2.64}$$

待计算出结果后再令 $\epsilon\to 0$, 这时被积函数改为

$$\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}}\mathrm{d}t\left[\frac{m}{2}\dot{x}^2-\frac{m}{2}\left(\omega^2-\mathrm{i}\epsilon\right)x^2+Jx\right]\right\} \tag{2.65}$$

由于轨道采用周期性边界条件, 下面采用傅里叶级数来计算. 先将上式中 $x(t)$, $J(t)$ 用其傅里叶变换来表示 (为简化记号, 取 $\hbar=1, m=1$)

$$\frac{1}{2}\left[\dot{x}^2-\left(\omega^2-\mathrm{i}\epsilon\right)x^2\right]=\frac{1}{2}\int\frac{\mathrm{d}k}{\sqrt{2\pi}}\frac{\mathrm{d}k'}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k+k')t}(-kk'-\omega^2+\mathrm{i}\epsilon)\tilde{x}(k)\tilde{x}(k'), \tag{2.66}$$

$$J(t)x(t)=\frac{1}{2}\int\frac{\mathrm{d}k}{\sqrt{2\pi}}\frac{\mathrm{d}k'}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k+k')t}\left[\tilde{x}(k)\tilde{J}(k')+\tilde{x}(k')\tilde{J}(k)\right]. \tag{2.67}$$

然后再对 t 积分, 计算中要用到 δ 函数的表达式为

$$\delta(x)=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}t}{2\pi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}tx}.$$

这样, 对 k' 积分后得

$$S^J[x(t)]=\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}k\left[\left(k^2-\omega^2+\mathrm{i}\epsilon\right)\tilde{x}(k)\tilde{x}(-k)+\tilde{x}(k)\tilde{J}(-k)+\tilde{x}(-k)\tilde{J}(k)\right].$$

在 k 空间换新变量

$$\tilde{y}(k)=\tilde{x}(k)+\frac{\tilde{J}(k)}{k^2-\omega^2+\mathrm{i}\epsilon},$$

即相当于在原来 t 空间作变换

$$y(t)=x(t)+\int\frac{\mathrm{d}k}{\sqrt{2\pi}}\frac{\tilde{J}(k)}{k^2-\omega^2+\mathrm{i}\epsilon}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kt}, \tag{2.68}$$

在新变量下, 有

$$\begin{aligned}Z_J(T)=&\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}k\frac{\tilde{J}(k)\tilde{J}(-k)}{k^2-\omega^2+\mathrm{i}\epsilon}\right)\\&\times\int\mathrm{D}y(t)(t)\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}k\tilde{y}(k)\left(k^2-\omega^2+\mathrm{i}\epsilon\right)\tilde{y}(-k)\right\}.\end{aligned} \tag{2.69}$$

注意: 变量变换 (2.68) 式造成路径积分测度变换的雅可比行列式为 1, 即 $\mathrm{D}y=\mathrm{D}x$, 即相当于利用稳相近似. 这样最终结果为

$$Z_J(T)=F(T)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S^J[x_{\mathrm{cl}}(t)]}, \tag{2.70}$$

其中, 量子涨落部分 $F(T)$ 与无外源谐振子相同, 即

$$\begin{aligned}F(T)=Z_0(T)&=\int_{x(-\frac{T}{2})=x(\frac{T}{2})}\mathrm{D}x(t)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}}\mathrm{d}t(\frac{1}{2}m\dot{x}^2-\frac{1}{2}m\omega^2x^2)}\\&=\frac{1}{2\mathrm{i}\sin\left(\dfrac{\omega T}{2}\right)},\end{aligned} \tag{2.71}$$

而

$$\begin{aligned}S^J[x_{cl}(t)]&=-\frac{m}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}k\frac{\tilde{J}(k)\tilde{J}(-k)}{k^2-\omega^2+\mathrm{i}\epsilon}\\&=\frac{m}{2}\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}}\mathrm{d}tJ(t)\mathcal{G}_F(t-t')J(t')\mathrm{d}t'.\end{aligned} \tag{2.72}$$

从 (2.70) 式看出, 在 $T\to\pm\infty$ 时, 体系为无外力场的自由谐振子, 所以, 相因子部分可以看成是, 当体系由过去 $T=-\infty$ 时加外源, 再演化到将来 $T=+\infty$ 时去掉外源这一过程中获得的转移振幅.

2.3 非保守体系的路径积分, 变频谐振子

2.3.1 含时体系的路径积分

对于非保守体系, 哈密顿量显含时间,

$$H=\frac{p^2}{2m}+V(x,t). \tag{2.73}$$

体系作用量泛函

$$S[x(t)] = \int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t \left(\frac{m}{2} \dot{x}(t)^2 - V(x(t), t) \right), \tag{2.74}$$

固定路径端点 $(x(t_a) = x_a, x(t_b) = x_b)$ 作泛函变分, 由 $\delta S = 0$ 导出的极值轨道 $x_{cl}(t)$ 满足运动方程

$$m \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2} x_{\mathrm{cl}}(t) + V'(x_{\mathrm{cl}}(t)) = 0. \tag{2.75}$$

量子涨落不是很强的情况, 可以采用稳相近似, 将作用量泛函在经典轨道附近展开, 即引入

$$x(t) = x_{\mathrm{cl}}(t) + \eta(t), \tag{2.76}$$

则体系作用量分成两部分

$$S[x(t)] = S[x_{\mathrm{cl}}(t)] + \frac{1}{2} \int\int \mathrm{d}t\mathrm{d}t' \eta(t) \frac{\delta^2 S}{\delta x_{\mathrm{cl}}(t) \delta x_{\mathrm{cl}}(t')} \eta(t') + O(\eta^3), \tag{2.77}$$

其中,

$$\frac{\delta^2 S}{\delta x_{\mathrm{cl}}(t) \delta x_{\mathrm{cl}}(t')} = \left(-m \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2} - V''(x_{\mathrm{cl}}(t), t) \right) \delta(t - t'). \tag{2.78}$$

并由极值轨道稳定条件, 要求二次变分 $\delta^2 S > 0$. 本章着重讨论平方型拉氏量, 故展开式 (2.77) 式中无高次项 $O(\eta^3)$, 另外记

$$V''(x_{\mathrm{cl}}(t), t) \equiv mW(t), \tag{2.79}$$

则非保守体系的费恩曼传播函数

$$\begin{aligned} K(x_b, t_b; x_a, t_a) &= \int_{x_a}^{x_b} \mathrm{D}x(t) \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t (\frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x, t))} \\ &= \int_{x_a}^{x_b} \mathrm{D}x(t) \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} S_{\mathrm{cl}}} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2\hbar} \int\int \mathrm{d}t\mathrm{d}t' \eta(t) \frac{\delta^2 S}{\delta x_{\mathrm{cl}}(t) \delta x_{\mathrm{cl}}(t')} \eta(t')} \\ &= F(t_b, t_a) \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} S_{\mathrm{cl}}}, \end{aligned} \tag{2.80}$$

其中, 非保守体系量子涨落因子

$$F(t_b, t_a) = \int_{\eta(t_a)=0}^{\eta(t_b)=0} \mathrm{D}\eta(t) \exp\left\{ -\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \frac{m}{2} \int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t \eta(t) \left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2} + W(t) \right] \eta(t) \right\}. \tag{2.81}$$

注意:

(1) 对于平方型拉氏量的非保守体系, 其费恩曼传播函数仍可用路径积分方法严格求解, (2.77) 式中无高次项 $O(\eta^3)$, 从而为研究实际模型提供了有效的事例.

(2) 对于含时的非保守体系, 问题往往比较复杂. 由于势能有关的参量 $W(t)$ 依赖时间, 从 (2.81) 式看体系相当于变频谐振子, 其量子涨落因子依赖起点时间及终点时间, 一般不再仅仅依赖于时间差.

在实际问题的研究中, 变频谐振子可描述变频激光, 分析激光含时相干态. 变频振子的严格解还可用作非线性振动零级近似表象的基矢. 再如对泡利势阱中粒子的量子运动, 利用所得严格解, 通过调节参数可以实现对势阱中粒子运动的控制.

关于变频谐振子费恩曼传播函数的量子涨落部分的计算十分重要, 为此先来介绍两种解法. 在 2.4 节和第 3 章中还要进行更深入的讨论.

2.3.2 黎曼-ζ 函数正则化方法

涨落算子与量子涨落因子 黎曼-ζ 函数正则化方法的主旨是研究作用在涨落路径 $x(t)$ 上的涨落算子

$$\Lambda = -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2} - W(t) \tag{2.82}$$

事实上, 对于任意时刻, 算子 Λ 具有正交归一的本征函数 $\{\phi_n(t)\}$ 作为完备基, 即

$$\Lambda\phi_n(t) = \lambda_n\phi_n(t), \quad \phi_n(t_a) = 0 = \phi_n(t_b). \tag{2.83}$$

以及

$$\int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t\phi_n(t)\phi_m(t) = \delta_{nm}. \tag{2.84}$$

任意满足边界条件 $\eta(t_a) = 0 = \eta(t_b)$ 的涨落路径 $\eta(t)$, 可用它们展开, 即

$$\eta(t) = \sum_n a_n\phi_n(t), \quad a_n = \int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t\phi_n(t)\eta(t). \tag{2.85}$$

这样 $\{a_n\}$ 组成一组新的积分变量, 使原来对被积的中间坐标变量的积分换为对 $\{a_n\}$ 的积分. 利用 $\{\phi_n(t)\}$ 满足的正交归一性质 (2.84) 式, 可将作用量 $S[\eta(t)]$ 对角化, 即

$$\begin{aligned} S[\eta(t)] &= \frac{m}{2}\int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t\eta(t)\Lambda\eta(t) = \frac{m}{2}\sum_n\sum_{n'}\lambda_n a_n a_{n'}\int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t\phi_{n'}(t)\phi_n(t) \\ &= \frac{m}{2}\sum_n \lambda_n a_n^2. \end{aligned}$$

由于

$$\lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar}\right)^{\frac{N}{2}}\int\prod_{k=1}^{N}\mathrm{d}a_k \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[\eta(t)]} = \left(\prod_{k=1}^{N}\lambda_k\right)^{-\frac{1}{2}} = \left\{\det\left[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2} - W(t)\right]\right\}^{-\frac{1}{2}} \tag{2.86}$$

再利用离散时间变量取极限, 可将量子涨落因子表示为

$$
\begin{aligned}
F(t_b,t_a) &= \int_0^0 \mathrm{D}\eta(t)\exp\left\{-\frac{m}{2\mathrm{i}\hbar}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\eta(t)\left[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}-W(t)\right]\eta(t)\right\} \\
&= \left(\frac{m}{\mathrm{i}\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\left\{\det\left[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}-W(t)\right]\right\}^{-\frac{1}{2}} \\
&= \left(\frac{m}{\mathrm{i}\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}(\det\Lambda)^{-\frac{1}{2}}.
\end{aligned}
\tag{2.87}
$$

可见变频谐振子体系的量子涨落因子取决于涨落算子的泛函行列式 $\det\Lambda$.

泛函行列式的正则化　涨落因子的泛函行列式 $\det\Lambda$ 为无穷维矩阵的行列式, 对它的计算首先需要对无穷多本征值乘积进行正则化 (regularize). 在场论中常用 ζ 函数正则化方法, 即将厄米椭圆算子 $\Lambda=-\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}-W(t)$ 的所有本征值 $\{\lambda_k\}$ 组成推广的黎曼-ζ 函数 (MP-ζ 函数) ①

$$
\zeta_\Lambda(s)=\sum_n\frac{1}{\lambda_n^s}=\sum_n \mathrm{e}^{-s\ln\lambda_n}. \tag{2.88}
$$

由于 $\zeta_\Lambda(s)$ 可半纯解析延拓到复 s 面, $s=0$ 为正则点, 因此可以定义

$$
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\zeta_\Lambda(s)=-\sum_n\ln\lambda_n\mathrm{e}^{-s\ln\lambda_n}, \tag{2.89}
$$

且容易得到

$$
\zeta'_\Lambda(0)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\zeta_\Lambda(s)\,|_{s=0}=-\sum_n\ln\lambda_n=-\ln\prod_n\lambda_n=-\ln\det\Lambda, \tag{2.90}
$$

所以可求得泛函行列式

$$
\det\Lambda=\prod_n\lambda_n=\mathrm{e}^{-\zeta'_\Lambda(0)}. \tag{2.91}
$$

泛函行列式 $\det\Lambda$ 的各种正则化方法, 在规范场、量子引力, 尤其是在分析规范反常等问题时非常重要.

应用举例　为了加深对黎曼-ζ 函数正则化方法的理解, 这里举两个简单的例子.

例 1　自由粒子 $\Lambda=-\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}$, 满足边值条件 (2.83) 式的本征函数为

$$
\phi_n=c_n\sin\frac{n\pi t}{T},\quad \lambda_n=\left(\frac{n\pi}{T}\right)^2.
$$

① Minakshisundavam S, Pleijel A. 1949. Some properties of the eigenfunction of the Laplace-operators on Riemanian manifolds. Can. J. Math., (I): 242～256.

相应的黎曼 -ζ 函数为

$$\zeta_\Lambda(s) = \sum_n \left(\frac{n\pi}{T}\right)^{-2s} = \left(\frac{T}{\pi}\right)^{2s} \sum_n \frac{1}{n^{2s}} = \left(\frac{T}{\pi}\right)^{2s} \zeta(2s),$$

其中, $\zeta(2s)$ 为标准的黎曼-ζ函数①, 已知

$$\zeta(0) = -\frac{1}{2}, \quad \zeta'(0) = -\frac{1}{2}\ln 2\pi\ ,$$

因此可算得

$$\begin{aligned}\zeta'_\Lambda(s)|_{s=0} &= \ln\frac{T^2}{\pi^2}\zeta(0) + 2\zeta'(0)\\ &= -\ln\frac{T}{\pi} - \ln 2\pi = -\ln 2T.\end{aligned}$$

由 (2.91) 式得

$$\det\left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\right) = \prod_{n=1}^{\infty}\left(\frac{n\pi}{T}\right)^2 = 2T. \tag{2.92}$$

代入 (2.87) 式得自由粒子的量子涨落因子

$$F_0(T) = \left(\frac{m}{\mathrm{i}2\pi\hbar T}\right)^{\frac{1}{2}}.$$

例 2 一维谐振子 $\Lambda_H = -\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2} - \omega^2$, 其本征值问题:

$$\Lambda_H\phi_n(t) = \left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2} - \omega^2\right)\phi_n(t) = \lambda_n\phi_n(t), \quad (0 \leqslant t \leqslant T).$$

边界条件为

$$\phi_n(0) = 0 = \phi_n(T)$$

算子 Λ_H 的本征值系列为

$$\lambda_n = \left(\frac{n\pi}{T}\right)^2 - \omega^2 = \frac{\pi^2}{T^2}\left[n^2 - \left(\frac{\omega T}{\pi}\right)^2\right], \tag{2.93}$$

黎曼 -ζ 函数

$$\zeta_{\Lambda_H}(s) = \left(\frac{T}{\pi}\right)^{2s} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\left[n^2 - \left(\dfrac{\omega T}{\pi}\right)^2\right]^s},$$

① 王竹溪, 郭敦仁. 2000. 特殊函数概论. 北京：北京大学出版社, 110.

由此可算得

$$\det \Lambda_H = \mathrm{e}^{-\zeta'_{\Lambda_H}(0)} = 2\frac{\sin\omega T}{\omega}.$$

另一方面, 也可直接利用 (2.93) 式和例 1 中自由粒子结果 ((2.92) 式), 得到

$$\begin{aligned}
\det \Lambda_H &= \prod_{n=1}^{\infty}\left[\left(\frac{n\pi}{T}\right)^2 - \omega^2\right] = \prod_{n=1}^{\infty}\left(\frac{n\pi}{T}\right)^2\left[1-\left(\frac{\omega T}{n\pi}\right)^2\right] \\
&= \det\left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\right)\prod_{n=1}^{\infty}\left[1-\left(\frac{\omega T}{n\pi}\right)^2\right] \\
&= 2\frac{\sin\omega T}{\omega}.
\end{aligned}$$

最后一步用到了无穷乘积公式. 因此一维谐振子量子涨落因子为

$$\begin{aligned}
F_H(T) &= \mathcal{N}\int_0^0 \mathrm{D}\eta(t)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\left(\frac{m}{\mathrm{i}\hbar}\right)\int_0^T \mathrm{d}t\,\eta(t)\left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}-\omega^2\right)\eta(t)} \\
&= \left(\frac{m}{\mathrm{i}\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\left[\det\left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}-\omega^2\right)\right]^{-\frac{1}{2}} \\
&= \left(\frac{m\omega}{\mathrm{i}2\pi\hbar\sin\omega T}\right)^{\frac{1}{2}}.
\end{aligned} \tag{2.94}$$

2.3.3 偏离场方法

下面从经典轨道偏离场 (雅可比场) 的角度来分析此问题. 雅可比场方法的主旨是通过变量变换, 将变频谐振子问题与自由粒子体系相联系, 从而可以更清楚地看出各种可精确求解体系间联系.

首先, 设法作变量变换使这个问题能约化为自由粒子体系. 为此采用如下方法: 第一步, 找出满足运动方程

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2} + W(t)\right)y(t) = 0 \tag{2.95}$$

的任意解 $y(t)$, 与方程 (2.83) 式不同, 这里仅要求解 $y(t)$ 在 t_a 时满足如下非零初始条件

$$y(t_a) \neq 0. \tag{2.96}$$

显然这样的解很多. 第二步, 利用 $y(t)$ 作变量变换 $x(t) \to z(t)$, 使原来的涨落路径 $x(t)$ 变为新的路径

$$z(t) = x(t) - \int_{t_a}^{t} \mathrm{d}s\frac{\dot{y}(s)}{y(s)}x(s), \tag{2.97}$$

此时 $z(t)$ 满足初始边界条件 $z(t_a) = x(t_a) = 0$.

对 (2.97) 式微分得

$$\dot{z}(t) = \dot{x}(t) - \frac{\dot{y}(t)}{y(t)} x(t) = \frac{\left(\dot{x}y - \dot{y}x\right)}{y}. \tag{2.98}$$

因为 $y(t_a) \neq 0$, 所以有

$$\int_{t_a}^{t} \mathrm{d}s \frac{\dot{z}(s)}{y(s)} = \int_{t_a}^{t} \mathrm{d}s \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\left(\frac{x}{y}\right) = \frac{x(t)}{y(t)}, \tag{2.99}$$

注意到 (2.99) 式为 (2.97) 式的逆变换 $(z \to x)$, 于是得

$$\dot{x} = \dot{z} + \dot{y}\frac{x}{y} = \dot{z} + \dot{y}\int_{t_a}^{t} \mathrm{d}s \frac{\dot{z}(s)}{y(s)},$$

再次微分得

$$\begin{aligned}
\ddot{x} &= \ddot{z} + \ddot{y}\int_{t_a}^{t} \mathrm{d}s \frac{\dot{z}(s)}{y(s)} + \dot{z}\frac{\dot{y}}{y} \\
&= \ddot{z} + \ddot{y}\frac{x}{y} + \dot{y}\frac{\dot{z}}{y},
\end{aligned}$$

所以,

$$\ddot{x} + Wx = \ddot{z} + \dot{y}\frac{\dot{z}}{y} + \left(\ddot{y} + Wy\right)\frac{x}{y} = \ddot{z} + \dot{y}\frac{\dot{z}}{y}.$$

最后一步用到了 (2.97) 式, 因此有

$$\begin{aligned}
S[x(t)] &= -\frac{m}{2}\int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t x \left(\ddot{z} + \dot{y}\frac{\dot{z}}{y}\right) \\
&= -\frac{m}{2}\int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t \left(-\dot{x}\dot{z} + x\dot{y}\frac{\dot{z}}{y}\right) - \frac{m}{2}\left[x(t)\dot{z}(t)\right]\Big|_{t_a}^{t_b} \\
&= \frac{m}{2}\int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t \dot{z}^2.
\end{aligned} \tag{2.100}$$

这样我们利用变换 (2.97) 式使 $S[x(t)]$ 表达成以变量 $z(t)$ 表示的自由粒子作用量.

非局域边界条件下的路径积分 必须强调的是新变量 $z(t)$ 满足的边界条件尚需谨慎研究. 虽然新变量满足起点条件

$$z(t_a) = 0,$$

但终点条件却很复杂. 由 (2.99) 式知 (因为 $x(t_b) = 0$)

$$\int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}s \frac{\dot{z}(s)}{y(s)} = 0,$$

此为非局域边界条件, 很难直接应用于新变量. 为此, 再做如下处理, 即先利用 δ 函数表示

$$\delta\left(x\left(t_b\right)\right)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}\alpha\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha x\left(t_b\right)},$$

将 (2.81) 式改写成

$$F\left(t_b,t_a\right)=\frac{1}{2\pi}\int_{x\left(t_a\right)=0}^{x\left(t_b\right)=\mathrm{arb}}\mathrm{D}x\left(t\right)\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}\alpha\exp\{-\mathrm{i}\alpha x\left(t_b\right)\}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S\left[x\left(t\right)\right]\right\}. \quad (2.101)$$

其中, 积分上限 $x(t_b)=\mathrm{arb}$(arbitrary, 任意的) 表示对此端点也需积分, 这里 δ 函数的插入使得结果相当于令 $x(t_b)=0$. 之后将 (2.100) 式代入 (2.101) 式, 并利用 (2.99) 式得

$$F\left(t_b,t_a\right)=\frac{1}{2\pi}\int_{x\left(t_a\right)=0}^{x\left(t_b\right)=\mathrm{arb}}\mathrm{D}z\left(t\right)\left[\left|\frac{\delta x}{\delta z}\right|\right]\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}\alpha\exp\left\{-\mathrm{i}\alpha y\left(t_b\right)\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}s\frac{\dot{z}\left(s\right)}{y\left(s\right)}\right\}$$
$$\times\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{m}{2}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\dot{z}\left(t\right)^2\right\},$$

上式指数上因子可改写为

$$\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{m}{2}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\left[\dot{z}\left(t\right)^2-\frac{2\hbar}{m}\alpha y\left(t_b\right)\frac{\dot{z}\left(t\right)}{y\left(t\right)}\right]$$
$$=\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{m}{2}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\left[\left(\dot{z}-\frac{\hbar}{m}\alpha\frac{y\left(t_b\right)}{y\left(t\right)}\right)^2-\frac{\hbar^2\alpha^2}{m^2}\frac{y^2\left(t_b\right)}{y^2\left(t\right)}\right].$$

令

$$\gamma\left(t\right)=z\left(t\right)-\frac{\hbar\alpha}{m}y\left(t_b\right)\int_{t_a}^{t}\frac{\mathrm{d}s}{y\left(s\right)}, \quad (2.102)$$

并注意到变换 (2.97) 式相对 $z(t)$ 为线性变换，即 $\left|\frac{\delta x}{\delta z}\right|$ 不依赖 $z(t)$，因此利用 (2.102) 式可将 $z(t)$ 变换为 $\gamma(t)$ (且变换的雅可比行列式为 1), 这样

$$F\left(t_b,t_a\right)=\frac{1}{2\pi}\left|\frac{\delta x}{\delta z}\right|\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}\alpha\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}\hbar\alpha^2}{2m}y^2\left(t_b\right)\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\frac{1}{y^2\left(t\right)}\right\}$$
$$\times\int_{\gamma\left(t_a\right)=0}^{\gamma\left(t_b\right)=\mathrm{arb}}\mathrm{D}\gamma\left(t\right)\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{m}{2}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\dot{\gamma}^2\left(t\right)\right\}, \quad (2.103)$$

即路径积分为自由粒子体系, 很容易解得

$$\int_{\gamma(t_a)=0}^{\gamma(t_b)=\text{arb}} \mathrm{D}\gamma(t)\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{m}{2}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\dot{\gamma}(t)^2} = \int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}xK_0(x,t_b;0,t_a)$$

$$= \sqrt{\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar(t_b-t_a)}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{m}{2}\frac{x^2}{t_b-t_a}}$$

$$=1.$$

代入 (2.103) 式后, 量子涨落因子变为仅对 α 求积的高斯型积分, 用公式

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\mathrm{i}a}}$$

可积出

$$F(t_b,t_a) = \left|\frac{\delta x}{\delta z}\right|\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar y^2(t_b)\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\frac{1}{y^2(t)}}\right)^{\frac{1}{2}}.$$

关于变换 (2.97) 式的雅可比行列式 $\left|\frac{\delta x}{\delta z}\right|$, 可如下用点阵计算方法处理. 为此将固定时间间隔 $T=t_b-t_a$ 分为 N 个小间隔后再取极限: $\epsilon=\frac{T}{N}\to 0, N\to\infty$. 对于中间点, 有

$$z(t_k)=z_k,\quad x(t_k)=x_k.$$

所以变换 (2.97) 式为

$$z_k = x_k - \epsilon\sum_{j=1}^{k}\frac{\dot{y}(t_j)}{y(t_j)}\frac{x_j+x_{j-1}}{2}. \tag{2.104}$$

因为变量变换的雅可比行列式由变换矩阵本征值的乘积给出, 故

$$J_N = \left|\frac{\partial z_k}{\partial x_j}\right| = \prod_{k=1}^{N}\left[1-\frac{1}{2}\frac{\dot{y}(t_k)}{y(t_k)}\epsilon\right], \tag{2.105}$$

所以,

$$\left|\frac{\delta z}{\delta x}\right| = \lim_{N\to\infty}J_N = \lim_{N\to\infty}\exp\left\{\ln\prod_{k=1}^{N}\left[1-\frac{1}{2}\frac{\dot{y}(t_k)}{y(t_k)}\epsilon\right]\right\}$$

$$= \lim_{N\to\infty}\exp\left\{\sum_{k=1}^{N}\ln\left[1-\frac{1}{2}\frac{\dot{y}(t_k)}{y(t_k)}\epsilon\right]\right\}$$

$$= \lim_{N\to\infty}\exp\left\{-\frac{1}{2}\sum_{k=1}^{N}\frac{\dot{y}(t_k)}{y(t)}\epsilon\right\}$$

$$
\begin{aligned}
&= \exp\left\{-\frac{1}{2}\int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t \frac{\dot{y}(t)}{y(t)}\right\} \\
&= \exp\left\{-\frac{1}{2}\ln\frac{y(t_b)}{y(t_a)}\right\} \\
&= \left[\frac{y(t_b)}{y(t_a)}\right]^{-\frac{1}{2}}.
\end{aligned}
$$

而

$$
\left|\frac{\partial x}{\partial z}\right| = \left|\frac{\partial z}{\partial x}\right|^{-1} = \left[\frac{y(t_b)}{y(t_a)}\right]^{\frac{1}{2}}, \tag{2.106}
$$

最后, 得

$$
F(t_b, t_a) = \int_{x(t_a)=0}^{x(t_b)=0} \mathrm{D}x(t)\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x(t)]} = \left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar y(t_a)\,y(t_b)\displaystyle\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\frac{1}{y^2(t)}}\right)^{\frac{1}{2}}, \tag{2.107}
$$

其中, $y(t)$ 为满足方程组

$$
\begin{cases}
\left[\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2} + W(t)\right] y(t) = 0, \\
y(t_a) \neq 0, \quad y(t_b) \neq 0
\end{cases} \tag{2.108}
$$

的任意解.

作为特例, 先将上述结果应用到自由粒子和谐振子情况.

例 1　自由粒子　此时 $W(t) = 0$.

可令 $y(t) = 1$, 符合条件 (2.108) 式, 代入 (2.107) 式得

$$
F_0(t_b, t_a) = \left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar(t_b - t_a)}\right)^{\frac{1}{2}}.
$$

例 2　谐振子　参量 $W(t) = \omega^2$. 此时可令 $y(t) = \cos\omega(t - t_a)$, 同样符合条件 (2.108) 式, 代入 (2.107) 得

$$
F_H(t_b, t_a) = \left[\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\cos\omega(t_b - t_a)\tan\omega(t_b - t_a)}\right]^{\frac{1}{2}} = \left[\frac{m\omega}{2\pi\mathrm{i}\hbar\sin\omega(t_b - t_a)}\right]^{\frac{1}{2}}.
$$

涨落算子行列式的发散规避　对于一般的拉氏量体系, 涨落算子行列式 $\det\Lambda$ 的计算常常会遇到发散问题. 下面介绍如何借助已求出的简单拉氏量的行列式来计算一些涨落算子行列式的方法.

对于 (2.107) 式的计算, 分析一下涨落算子行列式的比

$$\frac{\det(-\partial_t^2 - W(t))}{\det(-\partial_t^2 - V(t))} = \frac{y(t_a)y(t_b)\displaystyle\int_{t_a}^{t_b}\frac{\mathrm{d}t}{y^2(t)}}{y_v(t_a)y_v(t_b)\displaystyle\int_{t_a}^{t_b}\frac{\mathrm{d}t}{y_v^2(t)}}, \tag{2.109}$$

其中, $y(t)$ 是满足 (2.108) 的解, 并假定将 $W(t)$ 换为 $V(t)$ 后相应的解为 $y_v(t)$. 下面主要研究 $y(t_a)=0$ 的极限情况, 令

$$y(t) = J(t) + \epsilon K(t), \tag{2.110}$$

其中, $J(t), K(t)$ 均为满足运动方程的解, 但要求其满足如下边界条件:

$$J(t_a) = 0, \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}J(t)\bigg|_{t=t_a} = 1, \tag{2.111}$$

$$K(t_a) = 1, \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}K(t)\bigg|_{t=t_a} = 0. \tag{2.112}$$

类似地引入满足方程

$$(-\partial_t^2 - V(t))y_v(t) = 0$$

和上面边界条件的解

$$y_v(t) = J_v(t) + \epsilon K_v(t).$$

易证

$$\lim_{\epsilon\to 0}\frac{y(t_a)}{y_v(t_a)} = 1, \quad \lim_{\epsilon\to 0}\frac{y(t_b)}{y_v(t_b)} = \frac{J(t_b)}{J_v(t_b)}.$$

在积分下限, $t \to t_a$, 由于 $J(t_a)=0$, 再由 (2.110) 式知, 当 $\epsilon \to 0$ 时, $y(t) \to y(t_a) \to J(t_a) = 0$, 因此因子$\displaystyle\int_{t_a}^{t_b}\frac{\mathrm{d}t}{y^2(t)}$ 的积分发散. 这时对积分的主要贡献来自 t_a 的无穷小邻域, 积分发散度如同 $\displaystyle\int_{t_a}^{t_b}\frac{\mathrm{d}t}{(t-t_a)^2}$. 对于因子 $\displaystyle\int_{t_a}^{t_b}\frac{\mathrm{d}t}{y_v^2(t)}$, 其发散性质完全相同. 故有以下条件成立:

$$\lim_{\epsilon\to 0}\frac{\displaystyle\int_{t_a}^{t_b}\frac{\mathrm{d}t}{y^2(t)}}{\displaystyle\int_{t_a}^{t_b}\frac{\mathrm{d}t}{y_v^2(t)}} = 1,$$

结果 (2.109) 式约化为

$$\frac{\det(-\partial_t^2 - W(t))}{\det(-\partial_t^2 - V(t))} = \frac{J(t_b)}{J_v(t_b)}. \tag{2.113}$$

例如, 当 $V(t)=0$, 即为自由粒子体系, 相应 $J_v=t-t_a$, 有

$$\frac{\det(-\partial_t^2-W(t))}{\det(-\partial_t^2)}=\frac{J(t_b)}{t_b-t_a}, \tag{2.114}$$

因此

$$\begin{aligned}K(x_b,t_b;x_a,t_a)&=F(t_b,t_a)\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x_{cl}(t)]\right\}\\&=\left[\frac{\det(-\partial_t^2-W(t))}{\det(-\partial_t^2)}\right]^{-\frac{1}{2}}F_0(t_b,t_a)\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x_{cl}(t)]\right\}\\&=\left(\frac{t_b-t_a}{J(t_b)}\right)^{\frac{1}{2}}\left[\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar(t_b-t_a)}\right]^{\frac{1}{2}}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x_{cl}(t)]\right\}\\&=\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar J(t_b)}\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x_{cl}(t)]\right\}.\end{aligned} \tag{2.115}$$

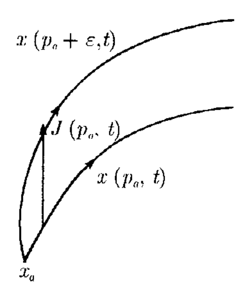


图 2.4

传播函数的泡利短核公式　在经典力学中常需讨论不同的初值条件 ($x(t_a)$ 相同但 $p(t_a)$ 不同) 的经典轨道间的变分. 相应的变分场称为雅可比场 (在量子场论中雅可比场相当于 Goldston 玻色子). 如图 2.4 所示, 过 x_a 点会有沿不同方向具有不同速度的一组经典轨道, 这可用下式描写

$$x(p+\epsilon,t)=x(p,t)+\frac{\epsilon J(p,t)}{m}+O(\epsilon^2),$$

即

$$\frac{J(p,t)}{m}=\lim_{\epsilon\to 0}\frac{x(p+\epsilon,t)-x(p,t)}{\epsilon}=\frac{\partial x(p,t)}{\partial p}. \tag{2.116}$$

此时经典哈密顿主函数是经典轨道的函数,

$$S_{\mathrm{cl}}=\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\left(\frac{1}{2}m\dot{x}_{cl}(t)^2-V(x_{cl}(t),t)\right)=S(x_b,t_b;x_a,t_a),$$

具有以下性质:

$$p_b=\frac{\partial S_{cl}}{\partial x_b},\quad p_a=-\frac{\partial S_{cl}}{\partial x_a}. \tag{2.117}$$

现设 $t_a=0, t_b=t$, 则

$$\frac{\partial x(p_a,t)}{\partial p_a}=\frac{J(p_a,t)}{m},$$

故由 (2.117) 式知

$$-\frac{\partial^2 S_{\rm cl}}{\partial x_a \partial x_b} = \frac{\partial p_a}{\partial x_b} = \left(\frac{\partial x_b}{\partial p_a}\right)^{-1} = \frac{m}{J(p_a, t)}. \tag{2.118}$$

代入 (2.115) 式得

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \left(\frac{1}{{\rm i}2\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \left(-\frac{\partial^2 S_{\rm cl}}{\partial x_a \partial x_b}\right)^{\frac{1}{2}} {\rm e}^{\frac{\rm i}{\hbar} S_{cl}}. \tag{2.119}$$

(2.119) 式常被称为传播函数的泡利 (Pauli) 短核公式. 对于一般保守力体系, 它是当 $T = t_b - t_a \to 0$ 的近似表达式, 故称为泡利短核公式. 仅对具有平方型拉氏量体系 (2.77) 式右端第三项可忽略, 此式才是精确表达式. 由以上分析看出, 经典轨道 $x_{cl}(t)$ 在路径积分计算中起着关键的作用, 在一定条件下, 即对平方型拉氏量体系, 体系经典哈密顿主函数决定了量子费恩曼传播函数.

举几个简单的例子.

例 3 一维自由粒子 哈密顿主函数为

$$S_{\rm cl} = \frac{m(x_b - x_a)^2}{2(t_b - t_a)},$$

于是

$$-\frac{\partial^2 S_{\rm cl}}{\partial x_a \partial x_b} = \frac{m}{t_b - t_a},$$

因此自由粒子费恩曼传播函数为

$$K_0(x_b, t_b; x_a, t_a) = \left[\frac{m}{2\pi{\rm i}\hbar(t_b - t_a)}\right]^{\frac{1}{2}} {\rm e}^{\frac{\rm i}{\hbar} S_{\rm cl}}. \tag{2.120}$$

例 4 一维谐振子 哈密顿主函数为

$$S_{\rm cl} = \frac{mw}{2\sin w(t_b - t_a)}[(x_b^2 + x_a^2)\cos w(t_b - t_a) - 2x_b x_a],$$

因此

$$-\frac{\partial^2 S_{\rm cl}}{\partial x_a \partial x_b} = \frac{mw}{\sin w(t_b - t_a)},$$

所以一维谐振子费恩曼传播函数为

$$K_w(x_b, t_b; x_a, t_a) = \left[\frac{mw}{2\pi{\rm i}\hbar \sin w(t_b - t_a)}\right]^{\frac{1}{2}} {\rm e}^{\frac{\rm i}{\hbar} S_{\rm cl}}.$$

例 5 变频率谐振子 体系的拉氏量为

$$L(t) = \frac{m}{2}\dot{x}^2 - \frac{m}{2}\omega^2(t) x^2, \tag{2.121}$$

欧拉–拉格朗日方程为

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}+\omega^2(t)\right)x(t)=0. \tag{2.122}$$

设方程的一般解具有

$$x(t)=f(t)[A\cos g(t)+B\sin g(t)]$$

形式则由边界条件 $x(t_a)=x_a$, $x(t_b)=x_b$ 可定出待定系数 A, B 为

$$x_{\mathrm{cl}}(t)=\frac{f(t)}{\sin(g_b-g_a)}\left[\frac{x_a}{f_a}\sin(g_b-g)-\frac{x_b}{f_b}\sin(g_a-g)\right],\quad 当\quad g_b-g_a\neq n\pi. \tag{2.123}$$

这样, 变频谐振子的哈密顿主函数为

$$\begin{aligned}S_{\mathrm{cl}}&=\int_{t_a}^{t_b}L(x,\dot{x},t)\mathrm{d}t=\frac{m}{2}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t(\dot{x}^2-\omega^2(t)x^2)\\&=\frac{m}{2}(\dot{x}x)\Big|_{t_a}^{t_b}-\frac{m}{2}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t x(t)\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}+\omega^2(t)\right)x(t)\\&=\frac{m}{2}(\dot{x}_b x_b-\dot{x}_a x_a),\end{aligned} \tag{2.124}$$

将 (2.123) 式代入, 得

$$S_{\mathrm{cl}}=\frac{m}{2}\left[\frac{\dot{f}_b x_b^2}{f_b}-\frac{\dot{f}_a x_a^2}{f_a}+(\dot{g}_b x_b^2+\dot{g}_a x_a^2)\cot(g_b-g_a)-2x_b x_a\frac{\sqrt{\dot{g}_b\dot{g}_a}}{\sin(g_b-g_a)}\right], \tag{2.125}$$

所以,

$$\frac{\partial^2 S_{\mathrm{cl}}}{\partial x_a\partial x_b}=-\frac{m\sqrt{\dot{g}_b\dot{g}_a}}{\sin(g_b-g_a)},$$

因此得变频谐振子费恩曼传播函数:

$$K(x_b,t_b;x_a,t_a)=\left[\frac{m\sqrt{\dot{g}_a\dot{g}_b}}{2\pi i\hbar\sin(g_b-g_a)}\right]^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S_{\mathrm{cl}}} \tag{2.126}$$

2.4　一般动力学体系的路径积分, 雅可比场、共轭点、Morse 指数

2.4.1　一般动力学体系中的稳相近似

前面几节介绍了计算平方型作用量体系的路径积分, 而实际理论常包含各种形式作用量, 它们常常是非常复杂, 常不能精确取值, 故常需采用各种近似方法. 例

如, 稳相近似、微扰展开 …… 见第 3 章、第 4 章分析. 本节仅简单介绍由稳相近似导出的路径积分半经典公式 (泡利短核公式). 采用稳相近似, 相当于按 $\hbar$ 幂次渐近展开, 相当于通常量子力学中的 WKB 近似. 在推导过程中可看出, 对于平方型拉氏量体系, 泡利短核公式为精确表达式, 如上节短核公式的分析, 而在本章最后一节中, 将其推广到分析一般作用量表达式, 相当于采用稳相近似.

当采用稳相近似, 经典轨道及相应哈密顿主函数 S_{cl} 起重要作用. 在分析过程中还注意到, 相对经典轨道的变分场: 雅可比场也起着突出作用. 因此本节还将着重分析介绍雅可比场, 共轭点 (conjugate point) 等重要概念. 在研究路径积分量子化时, 当所取时间间隔有限 (不是无限小), 极值经典轨道可能通过共轭点, 这时费恩曼核相因子还会有整体量子化贡献, 产生 Morse 指数. 下面分析这些问题.

稳相近似分析　对于在一般外势场 $V(x,t)$ 中运动的粒子, 作用量泛函

$$S[x(t)]=\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\left(\frac{m}{2}\dot{x}(t)^2-V(x,t)\right). \tag{2.127}$$

对轨迹作变分

$$\frac{\delta S[x(t)]}{\delta x(t')}=\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\left(-m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}x(t)-\frac{\partial V(x,t)}{\partial x}\right)\delta(t-t'), \tag{2.128}$$

$$\frac{\delta^2 S[x(t)]}{\delta x(t')\delta x(t'')}=\left(-m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t'^2}-\frac{\partial^2 V(x,t')}{\partial x^2}\right)\delta(t''-t'). \tag{2.129}$$

经典轨道满足 $\delta S=0$ 极值条件, 即 $x_{cl}(t)$ 满足运动方程

$$m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}x+\frac{\partial V(x,t)}{\partial x}=0, \tag{2.130}$$

极值稳定要求 $\delta^2 S>0$, 即涨落算子

$$\Lambda=-m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}-\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} \tag{2.131}$$

的本征方程

$$\Lambda y(t)=\lambda y(t) \tag{2.132}$$

的本征值 λ 恒正.

将作用量泛函在经典轨道附近展开, 即引入

$$x(t)=x_{\rm cl}(t)+\eta(t), \tag{2.133}$$

则

$$S[x(t)]=S[x_{\rm cl}(t)]+\frac{1}{2}\int\int \mathrm{d}t_1\mathrm{d}t_2\eta(t_1)\frac{\delta^2 S[x_{\rm cl}(t)]}{\delta x_{\rm cl}(t_1)\delta x_{cl}(t_2)}\eta(t_2)+O(\eta^3). \tag{2.134}$$

注意在 2.1 节也曾作类似展开, 在那里由于拉氏量为平方型, 故无高次项 $O(\eta^3)$, 可用路径积分法精确解出. 而本节分析势函数可具高次项的拉氏量, 这种情况下路径积分相对经典路径的扰动 ((2.133) 式), 只能是一种近似方法.

将 (2.134) 式代入费恩曼传播函数公式得

$$
\begin{aligned}
K(x_b,t_b;x_a,t_a) &= \int \mathrm{D}x(t)\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x(t)]\right\} \\
&= \int \mathrm{D}\eta(t)\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left\{S[x_{\mathrm{cl}}(t)]+\frac{1}{2}\int\int \mathrm{d}t_1\mathrm{d}t_2\eta(t_1)\right.\right. \\
&\quad \left.\left.\times\frac{\delta^2 S[x_{\mathrm{cl}}(t)]}{\delta x_{\mathrm{cl}}(t_1)\delta x_{\mathrm{cl}}(t_2)}\eta(t_2)+O(\eta^3)\right\}\right\} \\
&= \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x_{\mathrm{cl}}]\right\}\int_0^0 \mathrm{D}\eta(t)\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{2\hbar}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\eta(t)\right. \\
&\quad \left.\times\left(-m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}-V''(x_{\mathrm{cl}},t)\right)\eta(t)+O(\eta^3)\right\} \\
&= \left(\frac{m}{\mathrm{i}2\pi\hbar\det\Lambda}\right)^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x_{\mathrm{cl}}(t)]}(1+O(\hbar)),
\end{aligned}
$$

由 (2.133) 式可知, 上式第二步变换积分变量做 $\mathrm{D}x(t)\to\mathrm{D}\eta(t)$ 的积分测度变换行列式为 1, 而上式最后一步利用了推广的高斯积分. 注意, 对积分变量作尺度变换 $\mathrm{D}\eta\to\dfrac{\mathrm{D}\eta}{\sqrt{\hbar}}$, 并作高斯泛函积分后, 被忽略的相当于按 $\hbar$ 幂次渐近展开的高阶项. 这类似于 WKB 的半经典近似, 对此第 3 章专门讨论.

雅可比变分场　当 $T=t_b-t_a$ 很小, 经典解稳定条件 $\delta^2 S>0$, 要求涨落算子

$$
\Lambda(x_{\mathrm{cl}})=\left(-m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}-V''(x_{\mathrm{cl}})\right)
$$

的各本征值 $\lambda>0$, 利用与自由粒子体系相比, 即利用 (2.114) 式, 可得类似 (2.115) 式

$$
K(x_b,t_b;x_a,t_a)=\left(\frac{m}{\mathrm{i}2\pi\hbar J(t_b-t_a)}\right)^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x_{\mathrm{cl}}(t)]}(1+O(\hbar)), \tag{2.135}
$$

以上结果很容易推广到高维. 由于各维空间相互独立, $[\hat{x}_i,\hat{p}_j]=\mathrm{i}\hbar\delta_{ij}$, D 维空间费恩曼传播函数可表示为

$$
K(\boldsymbol{x}_b,t_b;\boldsymbol{x}_a,t_a)=\left(\frac{m}{\mathrm{i}2\pi\hbar}\right)^{\frac{D}{2}}(\det{}_D\boldsymbol{J}(\boldsymbol{p}_a,t))^{-\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[\boldsymbol{x}_{\mathrm{cl}}(t)]}(1+O(\hbar)), \tag{2.136}
$$

其中, $D\times D$ 矩阵值函数 $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{p}_a,t)$ 称为雅可比场, 是相对经典轨道的变分场, 如图 2.5 所示.

下面来确定雅可比场的行列式. 首先, 研究通过 $\boldsymbol{x}_a$ 点沿不同方向具有不同速度的一组经典轨道, $\boldsymbol{x}(\boldsymbol{p}_a, t)$, 它们满足经典运动方程

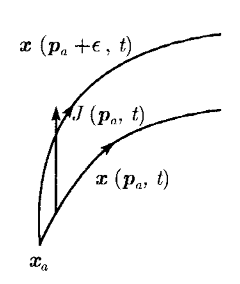


图 2.5

$$m\ddot{x}_k + \frac{\partial V}{\partial x_k} = 0 \tag{2.137}$$

及初始条件

$$\boldsymbol{x}(\boldsymbol{p}_a, 0) = \boldsymbol{x}_a,$$
$$m\dot{\boldsymbol{x}}(\boldsymbol{p}_a, 0) = \boldsymbol{p}_a.$$

其次, 考虑通过 $\boldsymbol{x}_a$ 点但是具有不同初始动量的另一条经典轨道

$$x_k(\boldsymbol{p}_a + \boldsymbol{\epsilon}, t) = x_k(\boldsymbol{p}_a, t) + \frac{J_{kl}(\boldsymbol{p}_a, t)\epsilon^l}{m} + O(\epsilon^2),$$

所以,

$$\frac{J_{kl}(\boldsymbol{p}_a, t)}{m} = \lim_{\epsilon^l \to 0} \frac{x^k(\boldsymbol{p}_a + \boldsymbol{\epsilon}, t) - x^k(\boldsymbol{p}_a, t)}{\epsilon^l} = \frac{\partial x^k(\boldsymbol{p}_a, t)}{\partial p_a^l}, \tag{2.138}$$

它们是 $D \times D$ 维矩阵 $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{p}_a, t)$ 的矩阵元.

$$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{p}_a, t) = (J_{kl}(\boldsymbol{p}_a, t)) = \left(m \frac{\partial x^k(\boldsymbol{p}_a, t)}{\partial p_a^l} \right). \tag{2.139}$$

将 (2.139) 式代入 (2.137) 式并对 p_a^l 取导数, 得雅可比场方程

$$m\ddot{J}_{kl}(p_a, t) + \sum_{n=1}^{D} \frac{\partial^2 V(x(p_a, t))}{\partial x^k \partial x^n} J_{ln}(p_a, t) = 0. \tag{2.140}$$

雅可比场就是上述方程满足初始条件

$$J_{kl}(\boldsymbol{p}_a, 0) = 0, \quad \dot{J}_{kl}(\boldsymbol{p}_a, 0) = \delta_{kl} \tag{2.141}$$

的解.

在经典力学中, 哈密顿主函数 $S_{\mathrm{cl}} = S(x_b t_b, x_a t_a)$ 是相空间上正则变换的生成函数, 它具有性质:

$$\boldsymbol{p}_b = \boldsymbol{\nabla}_{x_b} S_{\mathrm{cl}}, \quad \boldsymbol{p}_a = -\boldsymbol{\nabla}_{x_a} S_{\mathrm{cl}},$$

或

$$p_b^k = \frac{\partial S_{\mathrm{cl}}}{\partial x_b^k}, \quad p_a^k = -\frac{\partial S_{\mathrm{cl}}}{\partial x_a^k}.$$

而

$$\frac{J_{kl}(p_a, t)}{m} = \frac{\partial x(p_a, t)^l}{\partial p_a^k} = \left(\frac{\partial p_a^k}{\partial x_b^l} \right)^{-1} = -\left[\frac{\partial}{\partial x_b^l} \left(\frac{\partial S_{\mathrm{cl}}}{\partial x_a^k} \right) \right]^{-1},$$

因此

$$\det{}_D(J_{kl}(p_a,t)) = \left[\det{}_D\left(-\frac{\partial^2 S_{\rm cl}}{\partial x_b^l \partial x_a^k}\right)\right]^{-1}, \tag{2.142}$$

代入 (2.136) 式得 D 维空间短时费恩曼传播函数, 表示为 (泡利短核公式)

$$K(\boldsymbol{x}_b,t_b;\boldsymbol{x}_a,t_a) = \left(\frac{m}{\mathrm{i}2\pi\hbar}\right)^{\frac{D}{2}}\left(\det\left(-\frac{\partial^2 S_{\rm cl}}{\partial x_b^l \partial x_a^k}\right)\right)^{\frac{1}{2}} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x_{\rm cl}]}(1+O(\hbar)). \tag{2.143}$$

2.4.2 共轭点及 Morse 指数

共轭点与焦散点　如果存在另一经典轨道 $\boldsymbol{x}(\boldsymbol{p}_a+\boldsymbol{\epsilon},t)$, 具有初值

$$\boldsymbol{x}(\boldsymbol{p}_a+\boldsymbol{\epsilon},0)=\boldsymbol{x}_a, \quad m\dot{\boldsymbol{x}}(\boldsymbol{p}_a+\boldsymbol{\epsilon},0)=\boldsymbol{p}_a+\boldsymbol{\epsilon},$$

与轨道 $\boldsymbol{x}(\boldsymbol{p}_a,t)$ 在 $t=t_f$ 时相交, 即

$$\boldsymbol{x}(\boldsymbol{p}_a+\boldsymbol{\epsilon},t_f)=\boldsymbol{x}_f=\boldsymbol{x}(\boldsymbol{p}_a,t_f),$$

则称交点 $\boldsymbol{x}_f$ 为 $\boldsymbol{x}_a=\boldsymbol{x}(\boldsymbol{p}_a,0)$ 的共轭点, 也称为焦散点 (caustic point), 见图 2.6.

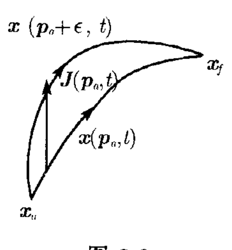


图 2.6

当时间间隔 $T=t_b-t_a$ 很短, 在时间间隔 $0\leqslant t<t_f\leqslant T$ 内, 沿经典轨道 $x_\gamma(t)$ 没有共轭点, 由于经典轨道 $x_\gamma(t)$ 是作用量泛函 $S[x(t)]$ 的极值, 故 $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{p}_a,t)$ 的所有本征值为正, 而当达到共轭点 $\boldsymbol{x}_\gamma(t_f)=\boldsymbol{x}_f$, 使最少有一本征值为零, 当继续增加时间, 会使 $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{p}_a,t)$ 出现负本征值. 沿经典轨道 $\boldsymbol{x}_\gamma(t)=\boldsymbol{x}(\boldsymbol{p}_a,t)$ 的雅可比场 $\boldsymbol{J}_\gamma(t)=\boldsymbol{J}(\boldsymbol{p}_a,t)$ 的负本征值数目 ν_γ 称为轨道 $\boldsymbol{x}_\gamma(t)$ 的 Morse 指数, 也就是在时间间隔 $0\leqslant t\leqslant T$ 沿 $\boldsymbol{x}_\gamma(t)$ 的与 $\boldsymbol{x}_a=\boldsymbol{x}_\gamma(0)$ 点共轭的共轭点数.

Morse 指数　经典轨道共轭点的存在反映出运动的复杂性和奇异性. 在计入经典轨道的共轭点后, 费恩曼传播函数的表达式 ((2.136) 式) 变为

$$\begin{aligned}K(x_b,t_b;x_a,t_a) &= \left(\frac{1}{\mathrm{i}2\pi\hbar}\right)^{\frac{D}{2}}\sum_\gamma \frac{\exp\left\{\dfrac{\mathrm{i}}{\hbar}S_\gamma(x_b,t_b;x_a,t_a)-\mathrm{i}\dfrac{\pi}{2}\nu_\gamma\right\}}{|\det \boldsymbol{J}_\gamma(t_b-t_a)|^{\frac{1}{2}}}(1+O(\hbar)) \\ &= \left(\frac{1}{\mathrm{i}2\pi\hbar}\right)^{\frac{D}{2}}\sum_\gamma\left(\det\left(-\frac{\partial^2 S_\gamma}{\partial x_b^j\partial x_a^k}\right)\right)^{\frac{1}{2}} \\ &\quad\times\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S_\gamma(x_b,t_b;x_a,t_a)-\mathrm{i}\frac{\pi}{2}\nu_\gamma\right\}(1+O(\hbar)).\end{aligned} \tag{2.144}$$

在实际问题的研究中, Morse 指数的计算十分重要, 下面以一维谐振子为例说明费恩曼传播函数相因子中 Morse 指数 ν_γ 的产生原因及计算方法.

一维谐振子的哈密顿主函数为

$$\begin{aligned} S_{\mathrm{cl}}(x_b,x_a,T)&=\frac{m\omega}{2\sin\omega T}[(x_b^2+x_a^2)\cos\omega T-2x_bx_a],\\ \frac{\partial^2 S_{\mathrm{cl}}}{\partial x_a\partial x_b}&=-\frac{m\omega}{\sin\omega T}. \end{aligned} \tag{2.145}$$

代入传播函数的泡利短核公式 (2.119) 式得

$$K(x_b,x_a,T)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{4}}\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar\sin\omega T}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{m\omega}{2\sin\omega T}[(x_b^2+x_a^2)\cos\omega T-2x_bx_a]}. \tag{2.146}$$

当 $0<T<\dfrac{\pi}{\omega}$ 时, (2.146) 式正确, 但是当 T 增大, 在 $T=\dfrac{\pi}{\omega}$ 时, (2.146) 式奇异. 这相当于经典轨道越过共轭点. 实际上 $T=n\dfrac{\pi}{\omega}$ $(n=1,2,\cdots)$ 均是一维谐振子的共轭点. 下面来计算当经典路径越过共轭点时相因子的改变. 在 (2.146) 式中令 $T=\dfrac{2\pi}{\omega}$, 得

$$K\left(x_b,x_a,\frac{2\pi}{\omega}\right)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{4}}\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}m\omega x_bx_a}. \tag{2.147}$$

注意到费恩曼传播函数的叠加性, 可将路径达到第一共轭点 $T=\dfrac{2\pi}{\omega}$ 时的费恩曼传播函数表示为

$$\begin{aligned} K\left(x_b,x_a,\frac{\pi}{\omega}\right)&=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}xK\left(x_b,x,\frac{\pi}{2\omega}\right)K\left(x,x_a,\frac{\pi}{2\omega}\right)\\ &=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{2}}\frac{m\omega}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}x}{2\pi}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}m\omega x(x_b+x_a)}\\ &=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{2}}\delta(x_b+x_a). \end{aligned}$$

类似地, 可以得到下面的关系

$$\begin{aligned} K\left(x_b,x_a,\frac{2\pi}{\omega}\right)&=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}xK\left(x_b,x,\frac{\pi}{\omega}\right)K\left(x,x_a,\frac{\pi}{\omega}\right)\\ &=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\delta(x_b+x)\delta(x+x_a)\\ &=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi}\delta(x_b-x_a), \end{aligned}$$

即每当越过共轭点, 费恩曼传播函数都多出一个相因子 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{2}}$, 类推可得

$$\lim_{T\to\left(\frac{n\pi}{\omega}\right)^+}K(x_b,x_a,T)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}n\frac{\pi}{2}}\delta(x_b-(-1)^nx_a). \tag{2.148}$$

以此作为以后费恩曼传播函数的初始条件, 故线性谐振子费恩曼传播函数应表示为

$$K(x_b,x_a,T)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{4}-\mathrm{i}\frac{\pi}{2}\left[\frac{\omega T}{\pi}\right]}\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar|\sin\omega T|}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{m\omega}{2\sin\omega T}[(x_b^2+x_a^2)\cos\omega T-2x_bx_a]}. \tag{2.149}$$

其中, $\left[\dfrac{\omega T}{\pi}\right]$ 表示小于 $\dfrac{\omega T}{\pi}$ 的最大整数, 即 Morse 指数.

习　题　2

1. 请用回路积分法证明谐振子费恩曼因果格林函数

$$\begin{aligned}G_F(t)&=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}E}{2\pi}\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et}}{E^2-\omega^2+\mathrm{i}\epsilon}\\&=\frac{1}{2\mathrm{i}\omega}\left(\Theta(t)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}+\Theta(-t)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\right),\quad \epsilon\to0^+.\end{aligned}$$

2. 假设作用量泛函

$$S[x_{\mathrm{cl}}(t)]=\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\left(\frac{m}{2}\dot{x}(t)^2-V(x(t),t)\right).$$

试对轨道 $x(t)$ 作变分, 求

$$\begin{aligned}\frac{\delta S[x(t)]}{\delta x(t')}&=\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\left(-m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}x(t)-\frac{\partial V(x,t)}{\partial x}\right)\delta(t-t'),\\\frac{\delta^2S[x(t)]}{\delta x(t')\delta x(t'')}&=\left(-m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t'^2}-\frac{\partial^2V(x,t')}{\partial x^2}\right)\delta(t''-t').\end{aligned}$$

注意利用变分公式:

$$\begin{aligned}\frac{\delta x(t)}{\delta x(t')}&=\delta(t-t'),\\\delta'(t)f(t)&=-\delta(t)f'(t).\end{aligned}$$

3. 已知传播函数的泡利短核公式:

$$K(x_b,x_a;T)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{4}}\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar\sin\omega T}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{m\omega}{2\sin\omega T}[(x_b^2+x_a^2)\cos\omega T-2x_ax_b]}.$$

请用数学归纳法证明一维线性谐振子的费恩曼传播函数:

$$K(x_b,x_a;T)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{4}-\mathrm{i}\frac{\pi}{2}\left[\frac{\omega T}{\pi}\right]}\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar|\sin\omega T|}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{m\omega}{2\sin\omega T}[(x_b^2+x_a^2)\cos\omega T-2x_ax_b]}.$$

第 3 章　路径积分的半经典近似与瞬子积分

3.1　量子力学中 WKB 近似

在实际问题的研究中常会遇到各种形式的相互作用, 而且会非常复杂, 故需要采用近似方法处理. 稳相近似是路径积分理论中一种重要的近似方法. 它相当于作用量按普朗克常数 $\hbar$ 的幂次作渐近展开, 这与通常量子力学中的 WKB 近似相当. 本章将在稳相近似下分析一般形式的拉氏量体系的路径积分理论, 称为路径积分的半经典近似. 为此首先简单回顾一下通常量子力学中 WKB 近似方法. 从 3.2 节开始, 讨论路径积分半经典近似.

3.1.1　薛定谔方程与 WKB 近似

量子力学与经典力学的相似性　引言中曾指出, 经典力学体系的哈密顿主函数 $S(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}_a,t)=S[x_{cl}]=S_{cl}$ 满足哈密顿-雅可比方程

$$\frac{\partial S}{\partial t}=-H\Big(\boldsymbol{x},\frac{\partial S}{\partial x_i},t\Big). \tag{3.1}$$

该方程为 $S(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}_a,t)$ 满足的二阶偏微分方程, 在形式上很像薛定谔方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=\hat{H}\psi, \tag{3.2}$$

都是将哈密顿量与时间演化联系在一起. 例如

$$H=\frac{p^2}{2m}+V(\boldsymbol{x},t), \tag{3.3}$$

则 (3.1) 式可化为如下形式:

$$\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{1}{2m}(\nabla S)^2+V(\boldsymbol{x},t)=0. \tag{3.4}$$

这里仍然称其为经典的哈密顿-雅可比方程. 解之可确定经典的哈密顿主函数 S_{cl}.

另一方面, 将 (3.3) 式中的坐标和动量换成算符, 代入 (3.2) 式, 则薛定谔方程在坐标表象中的形式为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{x},t)=\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\boldsymbol{x},t)\Big)\psi(\boldsymbol{x},t). \tag{3.5}$$

用 $\psi^*(\boldsymbol{x},t)$ 左乘上式, 然后减去其复共轭方程, 得

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi)-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\nabla\cdot(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)=0, \tag{3.6}$$

此即概率流密度满足的连续性方程

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{j}=0,$$

其中,

$$\rho=\psi^*\psi,\quad \boldsymbol{j}=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*).$$

上式表明概率守恒, 这是对波函数作概率幅解释的基础.

由于在量子力学中波函数一般为复函数, 所以方程 (3.5) 式实质上是两个方程. 令

$$\psi(\boldsymbol{x},t)=A\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S(\boldsymbol{x},t)}, \tag{3.7}$$

下面着重分析波函数相因子 $S(\boldsymbol{x},t)$ 所满足的方程, 将 (3.7) 式代入 (3.5) 式得

$$\left[\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{1}{2m}(\nabla S)^2-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\nabla^2 S+V(\boldsymbol{x},t)\right]\psi(\boldsymbol{x},t)=0. \tag{3.8}$$

即由此可见, 波函数的相因子 $S(\boldsymbol{x},t)$ 满足的方程与哈密顿–雅可比方程 (3.4) 式非常相似. 特别是当 $\hbar\to 0$ 时, 二者完全相同, 因此可将薛定谔方程解用其经典极限来逼近: 在取 $\hbar\to 0$ 极限的情况下, 相因子 S 趋于哈密顿主函数 S_{cl}, 也就是说, 若将 S 按 $\hbar$ 的幂级数展开

$$S=S_0+\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\right)S_1+\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\right)^2 S_2+\cdots, \tag{3.9}$$

其中, 首项 S_0 应为哈密顿主函数 S_{cl}.

哈密顿特性函数　借助经典力学知识可以对波函数相因子进行深入分析. 比如, 对于量子力学的定态问题, 为简单起见, 以一维保守力学体系为例, 哈密顿量不显含时间, 即

$$H=\frac{p^2}{2m}+V(x), \tag{3.10}$$

也就是保守系具有时间平移不变性, 能量 E 守恒, 哈密顿主函数仅依赖时间差 $T=t_b-t_a$,

$$\begin{aligned}S_{cl}&=\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}tL(x(t),\dot{x}(t))=\int_0^T\mathrm{d}t\left(\frac{\partial L}{\partial\dot{x}}\dot{x}-E\right)\Big|_c\\&=\int_{x_a}^{x_b}\mathrm{d}x\sqrt{2m(E-V(x))}-ET=W(x_b,x_a;E)-ET,\end{aligned} \tag{3.11}$$

其中,

$$W(x_b,x_a;E)=S_{cl}(x_b,x_a,T)+ET=\int_{x_a}^{x_b}\mathrm{d}x\sqrt{2m(E-V(x))},$$

称为哈密顿特性函数. 将依赖 T 的 S_{cl} 作勒让德变换使其成为依赖于 E 的特性函数 W, 即

$$\frac{\partial S_{cl}}{\partial t} = -E, \quad \frac{\partial S_{cl}}{\partial x_b} = \frac{\partial W}{\partial x_b} = p_b,$$

则特性函数 W 满足与时间无关的约化哈密顿–雅可比方程

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial W}{\partial x}\right)^2 + V(x) = E. \tag{3.12}$$

与上述经典力学分析相类似, 对薛定谔方程 (3.2) 式, 其中哈密顿量选取与时间无关, 见 (3.10) 式, 令

$$\psi(x,t) = \psi(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et},$$

得波函数 $\psi(x)$ 满足定态薛定谔方程

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\right)\psi(x) = E\psi(x), \tag{3.13}$$

它与经典约化哈密顿–雅可比方程 (3.12) 很类似. 若进一步再令 $\psi(x) = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S(x)}$ 代入 (3.13) 式, 则波函数相因子 $S(x)$ 应满足

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}x}\right)^2 + \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{1}{2m}\frac{\mathrm{d}^2 S}{\mathrm{d}x^2} = E - V(x). \tag{3.14}$$

这是个非线性方程 (Riccati 方程). 当 $\hbar \to 0$ 时与特性函数 W 满足的约化哈密顿–雅可比方程 (3.12) 式相同.

WKB 近似 基于上述分析, 下面讨论 WKB 近似. 将相因子 $S(x)$ 按 $\hbar$ 的幂级数展开的 (3.9) 式代入 (3.14) 式, 比较 $\hbar$ 的同幂次项, 逐级近似求解得
零级近似

$$\left(\frac{\mathrm{d}S_0(x)}{\mathrm{d}x}\right)^2 = 2m(E - V(x)), \tag{3.15}$$

一级近似

$$2S_0'S_1' + S_0'' = 0. \tag{3.16}$$

由零级近似方程得

$$S_0(x) = \pm\int^x \sqrt{2m(E - V(x'))}\mathrm{d}x' = \pm\int^x p\mathrm{d}x, \tag{3.17}$$

其中,

$$p = \sqrt{2m(E - V(x))}. \tag{3.18}$$

当 $E > V(x)$ 时, p 为实数, 相当于经典动量. 但就 WKB 近似而言, 对于经典解释无意义的区域 $E < V(x)$, 仍可应用, 这时, 应将 p 理解为纯虚数

$$p = \mathrm{i}\sqrt{2m(V(x)-E)} = \mathrm{i}|p|, \quad (E < V(x)). \tag{3.19}$$

再由一级近似方程得

$$S_1' = -\frac{1}{2}\frac{S_0''}{S_0'} = -\frac{1}{2}\frac{p'}{p} = \left(\ln p^{-\frac{1}{2}}\right)',$$

因此

$$S_1 = \ln p^{-\frac{1}{2}} + C, \tag{3.20}$$

其中, C 为积分常数, 仅影响波函数的归一化因子.

现在来看WKB 近似波函数, 可记为

$$\begin{aligned}\psi(x) &\approx \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S_0 + S_1 + \frac{\hbar}{\mathrm{i}}S_2 + \cdots} \\ &= \frac{A}{\sqrt{p}}\mathrm{e}^{\pm\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int^x p\mathrm{d}x}(1 + O(\hbar)).\end{aligned} \tag{3.21}$$

在经典允许区, $p(x)$ 为实, $\psi(x)$ 为振荡函数

$$\psi(x) \approx \frac{A}{\sqrt{p}}\mathrm{e}^{\pm\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int^x \mathrm{d}y\sqrt{2m(E-V(y))}},$$

在经典禁区, $p(x)$ 为纯虚, $\psi(x)$ 为指数函数

$$\psi(x) \approx \frac{A}{\sqrt{p}}\mathrm{e}^{\pm\frac{1}{\hbar}\int^x \sqrt{2m(V(y)-E)}\mathrm{d}y}.$$

WKB 近似的适用条件　下面分析 WKB 近似的适用条件. WKB 近似是利用相因子满足的非线性方程 (3.14) 式, 作大“相角”展开, 其适用条件要求 (3.14) 式中第二项小于第一项

$$\hbar\left|\frac{\mathrm{d}^2S}{\mathrm{d}x^2}\right| \ll \left|\left(\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}x}\right)^2\right|,$$

即

$$\hbar\left|\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}x}\right| \ll \left|p^2\right|,$$

可表示为

$$\lambda(x)\left|\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}x}\right| \ll |p(x)|, \tag{3.22}$$

或

$$\lambda(x)\left|\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\right| \ll |2(E-V(x))|. \tag{3.23}$$

式中, $\lambda(x) = \dfrac{h}{p}$, 为粒子的德布罗意 (de Bröglie) 波长. 这样在粒子的有效波长范围内动量改变很小 (与动量本身相比), 或势能改变很小 (与动能相比). 在经典允许区与禁区交界处附近, 即在转折点 ($V(x) = E$) 附近, 近似条件 (3.23) 不成立, 在这区

域中薛定谔方程的解需用别的解法解出, 然后再用连接条件讨论这些解, 定出各个待定常数.

对于 WKB 近似波函数 (3.21) 式, 很容易得到在经典允许区

$$\psi^*(x)\psi(x)\propto\frac{1}{p(x)}, \tag{3.24}$$

可见, 粒子出现在某位置的概率密度反比于粒子的动量或速度. 也就是说, 当粒子速度小的时候, 发现粒子的概率就大, 而当粒子速度大的时候, 发现粒子的概率就小, 这和经典力学中的情形完全一样. 因此, WKB 近似波函数是一个包含许多经典力学特点的量子波函数. WKB 近似一般称为准经典近似, 但是, 它比经典近似的应用范围要广, 因为它不仅适用于经典允许区 ($E>V(x)$, 为振荡解), 而且也适用于经典禁区 ($E<V(x)$, 为指数解). 在经典允许区, 当势为常数时, 其解可化为平常自由粒子的波函数 $\sim \mathrm{e}^{\pm\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}$.

转折点的连接公式 现在讨论在经典转折点附近的情况, 即如图 3.1 所示, 对于具有一定能量 E 的定态, $x=a$ 是转折点. 在远离转折点处, WKB 方法可以应用, 解如 (3.21) 公式所示. 注意到 (3.18) 式及 (3.19) 式, 在经典允许区 (如 3.1 图在经典转折点之左), 解 (3.21) 可表示为振荡函数, 即

$$\begin{aligned}\psi(x)&=\frac{C_1}{\sqrt{p}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_x^a p\mathrm{d}x}+\frac{C_2}{\sqrt{p}}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_x^a p\mathrm{d}x}\\&=\frac{C'}{\sqrt{p}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^a p\mathrm{d}x+\alpha\right),\quad 当E>V(x).\end{aligned} \tag{3.25}$$

图 3.1 转折点在经典允许区之右

其中, 常数 C_1 与 C_2(或 C' 与 α) 由具体问题的边界条件及归一化条件决定. 而在经典不允许区 (如 3.1 图在经典转折点之右), 解 (3.21) 可表示为实指数函数, 即

$$\psi(x)=\frac{C_3}{\sqrt{|p|}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}\int_a^x|p|\mathrm{d}x}+\frac{C_4}{\sqrt{|p|}}\mathrm{e}^{\frac{1}{\hbar}\int_a^x|p|\mathrm{d}x},\quad 当E<V(x). \tag{3.26}$$

其中, 常数 C_3 与 C_4 由边界条件及归一化条件决定. 进一步分析, 由于 (3.25) 式及 (3.26) 式表示的是同一定态在不同区域的表达式, 常数 C_3 、C_4 与 C_1、C_2 之间有

确定的关系. 为确定这两组常数间关系, 要求在转折点附近可精确求解. 并求出此精确解在离开转折点较远处的渐进行为, 这时 WKB 近似可以应用, 以便与 (3.25) 式和 (3.26) 式比较, 就可以找到两组常数之间的关系, 即确定连接公式, 使在 $x=a$ 附近波函数及其一阶导数连续.

Airy 函数与 Bessel 函数　这两个函数是处理波函数连续性问题的常用函数.

设势 $V(x)$ 在转折点附近变化缓慢, 可按泰勒级数展开, 并只取线性项, 即

$$\begin{aligned}V(x)&=V(a)+V'(a)(x-a)+\cdots\\&=E+\frac{\hbar^2}{2m}\alpha(x-a)+\cdots,\quad 当x\sim a.\end{aligned}\tag{3.27}$$

在此区域, 薛定谔方程近似表示为

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}-\alpha(x-a)\psi=0,\quad 当x\sim a.\tag{3.28}$$

艾里 (Airy) 方程为

$$\frac{\mathrm{d}^2\Phi}{\mathrm{d}z^2}+z\Phi=0$$

具有解Airy 函数$\Phi(z)=A_i(z)$, 其积分表达式为

$$A_i(z)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t\mathrm{e}^{\mathrm{i}(zt-\frac{1}{3}t^3)}=\frac{1}{\pi}\int_0^{\infty}\mathrm{d}t\cos\left(\frac{1}{3}t^3-zt\right).$$

用鞍点法可求出当 $z\to\pm\infty$ 时 Airy 函数的渐近表达式

$$A_i(z)\underset{z\to\infty}{\approx}\frac{1}{\sqrt{\pi}z^{\frac{1}{4}}}\cos\left(\frac{2}{3}z^{\frac{3}{2}}-\frac{\pi}{4}\right)\quad (具有周期行为)$$

$$A_i(z)\underset{-z\to\infty}{\approx}\frac{1}{2\sqrt{\pi}(-z)^{\frac{1}{4}}}\mathrm{e}^{-\frac{2}{3}(-z)^{\frac{3}{2}}}\quad (具有指数衰减行为)$$

正是利用这种行为, Airy 解可与 WKB 近似解光滑邻接 (波函数及其一阶导数连续). 如图 3.2 所示, 在转折点 $x=a$ 附近 Airy 解与 WKB 解的交叠.

在离开转折点较远处, WKB 波函数可用贝塞尔 (Bessel) 函数表达. 贝塞尔函数$J_n(z)$ 是满足下列贝塞尔方程的解:

$$\frac{\mathrm{d}^2J_n}{\mathrm{d}z^2}+\frac{1}{z}\frac{\mathrm{d}J_n}{\mathrm{d}z}+\left(1-\frac{n^2}{z^2}\right)J_n=0.\tag{3.29}$$

当 z 很大时, 具有如下形式渐近表达式①:

$$J_n(z)\sim\sqrt{\frac{2}{\pi z}}\cos\left(z-\frac{n\pi}{2}-\frac{\pi}{4}\right),\quad 当\ z\ 很大.\tag{3.30}$$

① 王竹溪, 郭敦仁. 2000. 特殊函数概论. 北京: 北京大学出版社, 418.

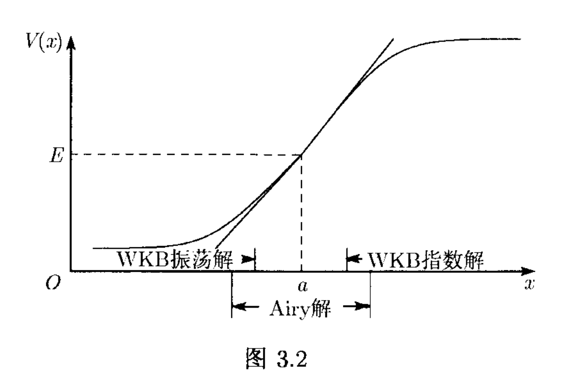


图 3.2

渐近解 (3.25) 式可表示为

$$\psi_{左} = \frac{C}{\sqrt{p}}\sqrt{\frac{\pi z}{2}}J_n(z), \quad z = \frac{1}{\hbar}\int_x^a p\mathrm{d}x. \tag{3.31}$$

下面将设法选择贝塞尔函数的阶 n, 使上述解在接近转折点附近时满足薛定谔方程 (3.28) 式. 这时由 (3.27) 式和 (3.31) 式知

$$z = \frac{2}{3}\sqrt{\alpha}(a-x)^{\frac{3}{2}}, \quad 当 x \sim a. \tag{3.32}$$

将 (3.31) 式代入 (3.28) 式, 要求 J_n 满足

$$\frac{\mathrm{d}^2 J_n}{\mathrm{d}x^2} - \frac{1}{a-x}\frac{\mathrm{d}J_n}{\mathrm{d}x} + \left[\alpha(a-x) - \frac{1}{4(a-x)^2}\right]J_n = 0. \tag{3.33}$$

利用 (3.32) 式, (3.33) 式化为

$$\frac{\mathrm{d}^2 J_n}{\mathrm{d}z^2} + \frac{1}{z}\frac{\mathrm{d}J_n}{\mathrm{d}z} + \left(1 - \frac{1}{9z^2}\right)J_n = 0. \tag{3.34}$$

与贝塞尔方程比较, 知道应选 $n = \pm\frac{1}{3}$, 即应取解

$$\psi_{左} = \sqrt{\frac{\pi z}{2p}}\left(AJ_{\frac{1}{3}}(z) + BJ_{-\frac{1}{3}}(z)\right). \tag{3.35}$$

类似地, 在 $E < V(x)$ 区域应选解

$$\psi_{右} = \sqrt{\frac{\pi z'}{2|p|}}\left(CI_{\frac{1}{3}}(z') + DI_{-\frac{1}{3}}(z')\right), \quad z' = \frac{1}{\hbar}\int_a^x |p|\mathrm{d}x, \tag{3.36}$$

其中, $I_{\pm\frac{1}{3}}$ 为虚宗量贝塞尔函数, $I_n(z) = \mathrm{i}^{-n}J_n(\mathrm{i}z)$. 当 z 很大时, 由 (3.30) 式和 (3.35) 式可得

$$\psi_{左} = \frac{1}{\sqrt{p}}\left[A\cos\left(z - \frac{5\pi}{12}\right) + B\cos\left(z - \frac{\pi}{12}\right)\right], \quad z = \frac{1}{\hbar}\int_x^a p\mathrm{d}x, \tag{3.37}$$

当 z' 很大时, $I_n(z') \sim \dfrac{1}{\sqrt{2\pi z'}}\left[\mathrm{e}^{z'} + \mathrm{e}^{-z'}\cos\left(n+\dfrac{1}{2}\right)\pi\right]$, 因此

$$\psi_{右} = \frac{1}{2\sqrt{|p|}}\left\{(C+D)\mathrm{e}^{z'} + \frac{\sqrt{3}}{2}(D-C)\mathrm{e}^{-z'}\right\}, \quad z' = \frac{1}{\hbar}\int_a^x |p|\mathrm{d}x. \tag{3.38}$$

下面分析在转折点附近, 它们与 Airy 解相重叠区, 如何选择待定系数 A, B, C, D 使上两解及其一阶导数光滑邻接.

在 z 很小时, 有

$$J_n(z) = I_n(z) = \frac{1}{\Gamma(n+1)}\left(\frac{z}{2}\right)^n, \quad 当 z \to 0 时. \tag{3.39}$$

当 $x \backsim a$ 时 (3.35) 式及 (3.36) 式化为

$$\psi_{左} \to \sqrt{\frac{\pi}{\hbar}}\left[A(3\alpha)^{\frac{1}{6}}\frac{a-x}{\Gamma\left(\frac{1}{3}\right)} + B\frac{1}{(3\alpha)^{\frac{1}{6}}\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)}\right],$$

$$\psi_{右} \to \sqrt{\frac{\pi}{\hbar}}\left[C(3\alpha)^{\frac{1}{6}}\frac{x-a}{\Gamma\left(\frac{1}{3}\right)} + D\frac{1}{(3\alpha)^{\frac{1}{6}}\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)}\right];$$

故为使上两解及其一阶导数在 $x \to a$ 时相等, 应要求

$$C = -A, \quad D = B. \tag{3.40}$$

将 (3.40) 式代入 (3.37) 式和 (3.38) 式得

$$\psi_{左} = \frac{1}{\sqrt{p}}\left[A\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^a p\mathrm{d}x - \frac{5\pi}{12}\right) + B\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^a p\mathrm{d}x - \frac{\pi}{12}\right)\right], \tag{3.41}$$

$$\psi_{右} = \frac{1}{2\sqrt{|p|}}\left[(B-A)\mathrm{e}^{\frac{1}{\hbar}\int_a^x |p|\mathrm{d}x} + (B+A)\frac{\sqrt{3}}{2}\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}\int_a^x |p|\mathrm{d}x}\right]. \tag{3.42}$$

令 $B = A = \dfrac{2}{\sqrt{3}}$, 得第一对连接式(3.43a). 类似地, 令 $B = -A = 1$, 得第二对连接式 (3.43b)

$$\frac{2}{\sqrt{p}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^a p\mathrm{d}x - \frac{\pi}{4}\right) \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{|p|}}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_a^x |p|\mathrm{d}x\right), \tag{3.43a}$$

$$-\frac{1}{\sqrt{p}}\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^a p\mathrm{d}x - \frac{\pi}{4}\right) \longleftarrow \frac{1}{\sqrt{|p|}}\exp\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x |p|\mathrm{d}x\right). \tag{3.43b}$$

见图 3.1 拐点在经典允许区之右. 条件 (3.43a) 式相当于右行波, 右端指数衰减对应左端远处为余弦波. 而条件 (3.43b) 相当于左行波, 当左端混有少量正弦波, 表明右端存在指数增加部分.

当转折点在经典允许区之左, 如图 3.3 所示, 可以作类似分析, 相应的连接公式可表达为

$$\frac{1}{\sqrt{|p|}}\exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\int_x^b |p|\mathrm{d}x\right\} \longleftarrow \frac{2}{\sqrt{p}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_b^x p\mathrm{d}x-\frac{\pi}{4}\right), \tag{3.44a}$$

$$\frac{1}{\sqrt{|p|}}\exp\left\{\frac{1}{\hbar}\int_x^b |p|\mathrm{d}x\right\} \longrightarrow -\frac{1}{\sqrt{p}}\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_b^x p\mathrm{d}x-\frac{\pi}{4}\right). \tag{3.44b}$$

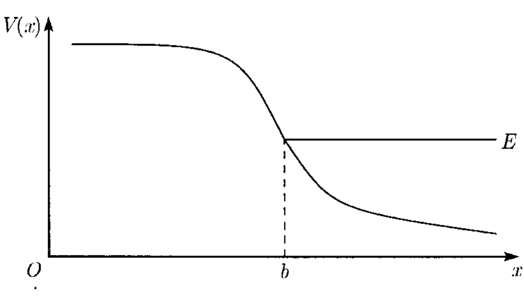


图 3.3 拐点在经典允许区之左

3.1.2 WKB 近似方法的应用举例

1. 势阱中运动粒子束缚态能谱的量子化条件

一维粒子束缚态, 定态非简并, 波函数为实. 在势阱中粒子经典运动有两转折点 a 和 b, (如图 3.4 所示) 量子态波函数在势阱外部区域 I、III 很快趋于零, 因此, 在区域 I 有

$$\psi_{\mathrm{I}} \approx \frac{A}{\sqrt{|p|}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}\int_x^b |p|\mathrm{d}x} \xleftarrow{(3.44\mathrm{a})} \psi_{\mathrm{II}} \approx \frac{2A}{\sqrt{p}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_b^x p\mathrm{d}x-\frac{\pi}{4}\right),$$

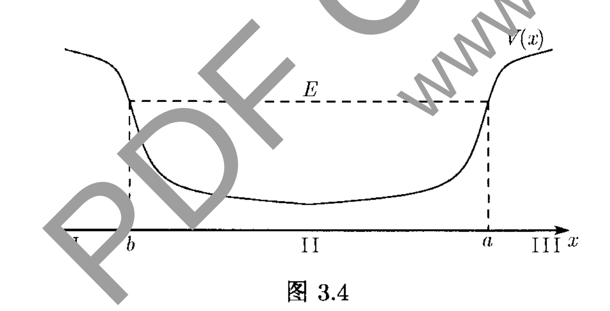


图 3.4

在区域 III 有

$$\psi_{\rm III} \approx \frac{A'}{\sqrt{|p|}} \mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}\int_a^x |p|\mathrm{d}x} \xleftarrow{(3.43\mathrm{a})} \psi'_{\rm II} \approx \frac{2A'}{\sqrt{p}} \cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^a p\mathrm{d}x - \frac{\pi}{4}\right).$$

由于一维势阱中运动粒子的束缚态非简并, 所以上面两个波函数 $\psi_{\rm II}$, $\psi'_{\rm II}$ 应一致, 即要求这两个余弦函数宗量和为 π 的整数倍

$$\frac{1}{\hbar}\int_a^b p\mathrm{d}x - \frac{\pi}{2} = n\pi, \quad (n = 0, 1, \cdots), \quad A' = (-1)^n A,$$

亦即

$$\int_a^b p\mathrm{d}x = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi\hbar. \tag{3.45}$$

此即玻尔–索末菲量子化条件 $\oint p\mathrm{d}x = \left(n + \frac{1}{2}\right)h$, 式中 $\oint \mathrm{d}x$ 是指对周期运动积分一个周期.

2. 势垒穿透问题

设势垒 $V(x)$ 如图 3.5 所示, 除转折点 a,b 附近以外, 在图上三个区域内, 可用 WKB 近似波函数:

$$\psi_{\rm I}(x) = \frac{1}{\sqrt{p}}\left[A\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^a p\mathrm{d}x - \frac{\pi}{4}\right)} + B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^a p\mathrm{d}x - \frac{\pi}{4}\right)}\right], \tag{3.46}$$

$$\psi_{\rm II}(x) = \frac{1}{\sqrt{|p|}}\left[C\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}\int_a^x |p|\mathrm{d}x} + D\mathrm{e}^{\frac{1}{\hbar}\int_a^x |p|\mathrm{d}x}\right], \tag{3.47}$$

$$\psi_{\rm III}(x) = \frac{1}{\sqrt{p}}\left[F\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(\frac{1}{\hbar}\int_b^x p\mathrm{d}x - \frac{\pi}{4}\right)} + G\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(\frac{1}{\hbar}\int_b^x p\mathrm{d}x - \frac{\pi}{4}\right)}\right]. \tag{3.48}$$

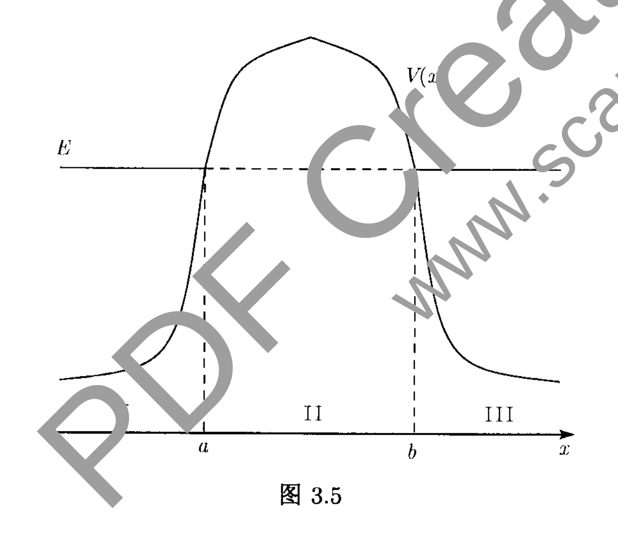


图 3.5

注意:

(1) 指数上固定相角 $\pm\mathrm{i}\dfrac{\pi}{4}$, 是由连接条件决定的;

(2) 在区域 II, $E < V(x)$, $\quad p = -\mathrm{i}\sqrt{2m(V-E)} = -\mathrm{i}|p|$;

(3) 对于能量为 E 的定态, 以上各式乘以时间演化因子 $\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}$ 后可以看出, F 项、B 项为右行波, A 项、G 项为左行波.

下面假设粒子在 I 区沿正 x 方向运动, 在 a 点遇势垒后, 部分反射, 部分穿越势垒入射到第 III 区, 在第 III 区只有透射波, 故设 $G=0$, 则

$$\begin{aligned}\psi_{\mathrm{III}}(x) &= \frac{1}{\sqrt{p}}F\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(\frac{1}{\hbar}\int_b^x p\mathrm{d}x - \frac{\pi}{4}\right)} \\ &= \frac{1}{\sqrt{p}}F\left[\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_b^x p\mathrm{d}x - \frac{\pi}{4}\right) + \mathrm{i}\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_b^x p\mathrm{d}x - \frac{\pi}{4}\right)\right].\end{aligned} \tag{3.49}$$

由连接公式 (3.44a) 和 (3.44b) 式得

$$\begin{aligned}\psi_{\mathrm{II}}(x) &= \frac{1}{\sqrt{|p|}}\left[\frac{F}{2}\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}\int_x^b |p|\mathrm{d}x} - \mathrm{i}F\mathrm{e}^{\frac{1}{\hbar}\int_x^b |p|\mathrm{d}x}\right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{|p|}}\left[C\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}\int_a^x |p|\mathrm{d}x} + D\mathrm{e}^{\frac{1}{\hbar}\int_a^x |p|\mathrm{d}x}\right],\end{aligned} \tag{3.50}$$

其中,

$$\begin{aligned}&D = \frac{F}{2}\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}\int_a^b |p|\mathrm{d}x} \equiv \frac{F}{2}\mathrm{e}^{-\alpha}, \quad \alpha = -\frac{1}{\hbar}\int_a^b |p|\,\mathrm{d}x, \\ &C = -\mathrm{i}F\mathrm{e}^{\frac{1}{\hbar}\int_a^b |p|\mathrm{d}x} \equiv -\mathrm{i}F\mathrm{e}^{\alpha}.\end{aligned} \tag{3.51}$$

再利用连接公式 (3.43a) 和 (3.43b) 式得

$$\begin{aligned}\psi_{\mathrm{I}} &= \frac{1}{\sqrt{p}}\left[2C\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^a p\mathrm{d}x - \frac{\pi}{4}\right) - D\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^a p\mathrm{d}x - \frac{\pi}{4}\right)\right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{p}}\left[\left(C + \frac{\mathrm{i}}{2}D\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^a p\mathrm{d}x - \frac{\pi}{4}\right)} + \left(C - \frac{\mathrm{i}}{2}D\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^a p\mathrm{d}x - \frac{\pi}{4}\right)}\right],\end{aligned} \tag{3.52}$$

即

$$\begin{aligned}&A = C + \frac{\mathrm{i}}{2}D = -\mathrm{i}F\left(\mathrm{e}^{\alpha} - \frac{1}{4}\mathrm{e}^{-\alpha}\right), \quad \alpha = \frac{1}{\hbar}\int_a^b |p|\,\mathrm{d}x, \\ &B = C - \frac{\mathrm{i}}{2}D = -\mathrm{i}F\left(\mathrm{e}^{\alpha} + \frac{1}{4}\mathrm{e}^{-\alpha}\right).\end{aligned} \tag{3.53}$$

因此, 透射系数为

$$T = \left|\frac{F}{B}\right|^2 = \frac{1}{\left(\mathrm{e}^{\alpha} + \frac{1}{4}\mathrm{e}^{-\alpha}\right)^2} \approx \mathrm{e}^{-2\alpha}, \tag{3.54}$$

反射系数为

$$R = \left|\frac{A}{B}\right|^2 = \left|\frac{\mathrm{e}^{\alpha} - \dfrac{1}{4}\mathrm{e}^{-\alpha}}{\mathrm{e}^{\alpha} + \dfrac{1}{4}\mathrm{e}^{-\alpha}}\right|^2 \approx 1 - \mathrm{e}^{-2\alpha}, \tag{3.55}$$

满足等式 $T + R = 1$. 因此透射系数为

$$T \approx \mathrm{e}^{-\frac{2}{\hbar}\int_a^b |p| \mathrm{d}x} = \mathrm{e}^{-\frac{2}{\hbar}\int_a^b \sqrt{2m(V(x)-E)}\mathrm{d}x}. \tag{3.56}$$

这是一个很有用的公式, 在准经典近似条件下 (即 $T \ll 1$) 适用.

3. 双势阱问题

模型与基态的特性　这里着重分析双势阱基态分裂问题. 考虑一个粒子在下列一维势阱中运动:

$$V(x) = \frac{g^2}{8}(x^2 - a^2)^2. \tag{3.57}$$

其中, g 为耦合常数, a 为常数.

如图 3.6 所示, 势相对原点是对称的, 原点为极大值, 即

$$V(x=0) = \frac{g^2 a^4}{8}. \tag{3.58}$$

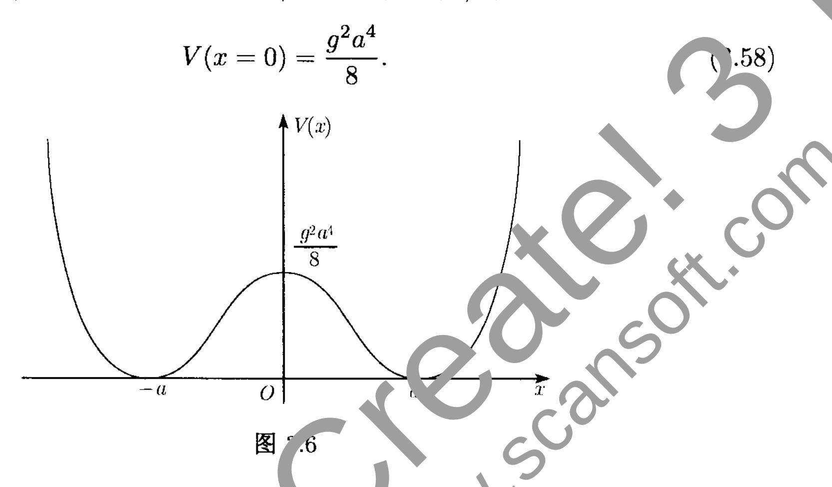


图 3.6

势的两极小点在 $x = \pm a$ 处, 在该点

$$V(x=\pm a) = 0,$$
$$V''(x=\pm a) = g^2 a^2 \equiv m\omega^2, \tag{3.59}$$

其中 ω 可以认为是在势的最小值附近振动谐振子的角频率.

当 g 很大时, 两势阱被中间很高的势垒隔开, 此时, 则如一粒子在一阱中运动, 它将长期停留在此阱中. 由于问题的对称性, 两阱中粒子具有简并能级. 下面来分析基态.

令 $\psi_0(x)$ 为在右势阱中具有能量 E_0 的基态波函数 $\psi_0(x)$ 满足

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi_0(x)}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E_0-V(x))\psi_0(x)=0. \tag{3.60}$$

由于问题的对称性, $\psi_0(-x)$ 为在左势阱中具有能量 E_0 的基态波函数. 事实上此两波函数的任意线性组合均具有相同简并能级. 例如, 对称态波函数

$$\psi_1(x)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_0(x)+\psi_0(-x)], \tag{3.61}$$

和反称态波函数

$$\psi_2(x)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_0(x)-\psi_0(-x)]. \tag{3.62}$$

当耦合常数 g 有限, 即双阱中间势垒高度有限, 则有势垒穿透效应发生, 从而使两阱中状态发生混合、相干而造成能级分裂. 由于体系的哈密顿量, 具有空间反演对称性, 宇称守恒, 表明哈密顿量 H 的本征态可处的偶态 ψ_1 或奇态 ψ_2, 由于隧道效应使这两能级不再简并. 设偶态 ψ_1 能级为 E_1, 奇态 ψ_2 能级为 E_2, 即它们满足的方程为

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi_1(x)}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E_1-V(x))\psi_1(x)=0, \tag{3.63}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi_2(x)}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E_2-V(x))\psi_2(x)=0. \tag{3.64}$$

将 (3.60) 式乘 ψ_1, (3.63) 式乘 ψ_0, 两者相减得

$$\psi_1\frac{\mathrm{d}^2\psi_0}{\mathrm{d}x^2}-\psi_0\frac{\mathrm{d}^2\psi_1}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2m}{\hbar}(E_0-E_1)\psi_1\psi_0=0. \tag{3.65}$$

为讨论简单起见, 假定 g 虽有限, 但仍足够大. 注意到一维势阱中粒子束缚态非简并, 波函数为实, 可设波函数 $\psi_0(x)$ 在右势阱中归一, 即

$$\int_0^\infty\psi_0^2(x)\mathrm{d}x=1. \tag{3.66}$$

$\psi(-x)$ 是在左阱中的归一波函数, 而在右阱中具有很小值. 故可假定 $\psi_0(x)\psi_0(-x)$ 各处可忽略, 并有

$$\int_0^\infty\mathrm{d}x\psi_1(x)\psi_0(x)\overset{(3.61)}{\approx}\frac{1}{\sqrt{2}}\int_0^\infty\mathrm{d}x\psi_0(x)^2\approx\frac{1}{\sqrt{2}}. \tag{3.67}$$

另将 (3.65) 式积分得

$$-(\psi_1(x)\psi_0'(x)-\psi_0(x)\psi_1'(x))\,|_0^\infty+\frac{2m}{\hbar^2}(E_0-E_1)\frac{1}{\sqrt{2}}=0, \tag{3.68}$$

于是

$$E_0 - E_1 = \frac{\hbar^2}{\sqrt{2}m}(\psi_1(0)\psi_0'(0) - \psi_0(0)\psi_1'(0)). \tag{3.69}$$

由对称和反对称波函数表达式知

$$\psi_1(0) = \sqrt{2}\psi_0(0), \quad \psi_1'(0) = 0, \tag{3.70}$$

那么

$$E_0 - E_1 = \frac{\hbar^2}{m}\psi_0(0)\psi_0'(0). \tag{3.71}$$

下面采用 WKB 近似波函数

$$\psi(x) \approx \frac{N}{\sqrt{p(x)}} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int^x \mathrm{d}x' p(x')}, \tag{3.72}$$

其中, 归一化因子

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \psi(x)^* \psi(x) \approx \int_{x_a}^{x_b} \mathrm{d}x \psi(x)^* \psi(x) \approx \mid N \mid^2 \int_{x_a}^{x_b} \frac{\mathrm{d}x}{p(x)} = 1. \tag{3.73}$$

由于经典谐振子周期

$$T = \frac{2\pi}{w} = 2\int_{x_a}^{x_b} \frac{\mathrm{d}x}{v(x)} = 2m\int_{x_a}^{x_b} \frac{\mathrm{d}x}{p(x)} = \frac{2m}{\mid N \mid^2}, \tag{3.74}$$

则

$$N^2 = \frac{2m}{T} = \frac{m\omega}{\pi}. \tag{3.75}$$

在经典禁区 WKB 近似波函数

$$\psi(x) = \frac{N}{\sqrt{\mid p \mid}} \mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}\int^x \mathrm{d}x |p(x)|}, \tag{3.76}$$

所以有

$$\psi_0(0) = \sqrt{\frac{\omega}{\pi v(0)}} \mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}\int_0^a \mathrm{d}x |p(x)|}, \quad \psi_0'(0) = \frac{mv(0)}{\hbar}\psi_0(0), \tag{3.77}$$

其中

$$v(0) = \sqrt{\frac{2}{m}(V(0) - E_0)}, \quad V(0) \gg E_0. \tag{3.78}$$

将以上结果代入 (3.71) 式, 有

$$\begin{aligned} E_0 - E_1 &= \frac{\hbar^2}{m}\frac{mv(0)}{\hbar}(\psi_0(0))^2 \\ &= \frac{\hbar\omega}{\pi}\mathrm{e}^{-\frac{2}{\hbar}\int_0^a \mathrm{d}x |p(x)|}, \end{aligned} \tag{3.79}$$

类似可算得

$$E_2 - E_0 = \frac{\hbar\omega}{\pi} \mathrm{e}^{-\frac{2}{\hbar}\int_0^a \mathrm{d}x|p(x)|}. \tag{3.80}$$

基态能级分裂 从以上分析可以看出, 由于隧道效应, 使这两能级不再简并, 而产生能级劈裂:

$$\boldsymbol{\Delta} E = E_2 - E_1 = \frac{2\hbar\omega}{\pi} \mathrm{e}^{-\frac{2}{\hbar}\int_0^a \mathrm{d}x|p(x)|} . \tag{3.81}$$

进一步注意到量子力学基态有零点振动, 基态能量为

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega, \quad V''(x = \pm a) = g^2 a^2 = m\omega^2 . \tag{3.82}$$

在右势阱中基态转折点 x_r 位于

$$\frac{1}{2} m\omega^2 (x_r - a)^2 = E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}, \tag{3.83}$$

于是

$$x_r = a \pm \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} . \tag{3.84}$$

类似左势阱基态转折点 x_l 位于

$$x_l = -a \pm \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} .$$

故代替 (3.82) 式能级分裂为

$$\boldsymbol{\Delta} E = E_2 - E_1 = \frac{2\hbar\omega}{\pi} \mathrm{e}^{-\frac{2}{\hbar}\int_0^{a-\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}} \mathrm{d}x|p(x)|} . \tag{3.85}$$

其中,

$$\begin{aligned} |\, p(x) \,| &= \sqrt{2m(V(x) - E_0)} = \sqrt{2m\left[\frac{g^2}{8}(x^2 - a^2)^2 - \frac{\hbar\omega}{2}\right]} \\ &= \frac{m\omega(a^2 - x^2)}{2a}\left(1 - \frac{4a^2\hbar}{m\omega(a^2 - x^2)^2}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad g^2 a^2 = m\omega^2 \\ &\approx \frac{m\omega}{2a}(a^2 - x^2) - \frac{a\hbar}{a^2 - x^2} . \end{aligned} \tag{3.86}$$

进而

$$\int_0^{a-b} \mathrm{d}x \,|\, p(x) \,| = \frac{m\omega}{2} a(a - b) - \frac{m\omega}{6a}(a - b)^3 - \frac{\hbar}{2} \ln \frac{a + x}{a - x}\bigg|_0^{a-b}, \quad b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

$$
\begin{aligned}
&=\frac{m\omega}{2a}(a-b)\Big[a^2-\frac{1}{3}(a-b)^2\Big]-\frac{\hbar}{2}\ln\frac{2a-b}{b}\\
&=\frac{m\omega}{3}a^2-\frac{m\omega}{2}b^2+\frac{m\omega b^3}{6a}+\frac{\hbar}{2}\ln\frac{b}{a}-\frac{\hbar}{2}\ln\left(2-\frac{b}{a}\right)\\
&=\frac{m\omega}{3}a^2-\frac{\hbar}{2}+\frac{\hbar}{2}\ln\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega a^2}}-\frac{\hbar}{2}\ln\left(2-\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega a^2}}\right)+O(\hbar^{\frac{3}{2}})\\
&=\frac{1}{2}S_0+\frac{\hbar}{2}\ln\left(\frac{1}{2a\mathrm{e}}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\right)+O(\hbar^{\frac{3}{2}})\ .
\end{aligned}
\tag{3.87}
$$

代入 (3.85) 式得

$$
\begin{aligned}
\Delta E&\approx\frac{2\hbar\omega}{\pi}2a\mathrm{e}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}S_0}\\
&=\frac{4a\mathrm{e}\omega^{\frac{3}{2}}}{\pi}\sqrt{m\hbar}\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}S_0},
\end{aligned}
\tag{3.88}
$$

其中,

$$
S_0=\int_{-a}^{a}\mathrm{d}x\sqrt{2mV(x)}=\int_{-a}^{a}\mathrm{d}x\frac{m\omega}{2a}(x^2-a^2)=\frac{2\omega}{3}ma^2.
$$

3.2 路径积分的半经典近似 (稳相近似)

本节着重分析路积分中稳相近似方法与通常量子力学中 WKB 近似的关系, 分析量子态密度的迹公式, 莫尔斯 (Morse) 指数.

最陡下降法 费恩曼传播函数路径积分表达式

$$
K(x_b,t_b;x_a,t_a)=\int_{x_a}^{x_b}\mathrm{D}x(t)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\left(\frac{1}{2}\dot{x}(t)^2-V(x(t))\right)}=\int_{x_a}^{x_b}\mathrm{D}x(t)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x(t)]|_{t_a}^{t_b}}.
\tag{3.89}
$$

前面曾多次提到将上面泛函积分在经典路径 $x_{cl}(t)(\delta S=0)$ 附近展开, 也即相当于作用量泛函按 $\hbar$ 幂次渐近展开, 被称为稳相近似 (鞍点展开或最陡下降法). 为了更清楚显示稳相近似的特点, 下面以一维积分为例来说明.

假设要展开的函数具有下列积分表达式:

$$
I(\lambda)=\int_a^b\mathrm{d}xg(x)\mathrm{e}^{\lambda f(x)}.
\tag{3.90}
$$

当 $f(x),g(x)$ 都是实函数时, $f(x)$ 在积分区间 $[a,b]$ 中某点 x_0 有一极大值. 当 λ 很大时, $\mathrm{e}^{\lambda f(x)}$ 在 x_0 点将有一很陡的极大值. 这时, 只要 $g(x)$ 的变化不能与 $\mathrm{e}^{\lambda f(x)}$ 的变化相比, 则上式积分值将主要是在 $x=x_0$ 点附近积分的贡献. 当 $f(x)$ 为复变解析函数时, $\mathrm{Re}(\lambda f(x))$ 是这个解析函数的实部, 因为它满足拉普拉斯方程, 其二阶导

数不可能都是负的, 故没有极大值. 而且 $\exp\{\mathrm{iIm}(\lambda f(x))\}$ 当 λ 很大时是一个振荡很快的函数, 这时可以改变上式中的积分路线, 使它通过 $f'(x)$ 的零点 x_0, 并使在沿积分路线上 $f(x)$ 的虚部保持不变, 即沿此路径 $\exp\{\mathrm{iIm}(\lambda f(x))\}$ 不再快速振荡. 例如

$$f(x)=\mu(x)+\mathrm{i}\nu(x),\quad |f'(x)|=\sqrt{\mu'(x)^2+\nu'(x)^2}, \tag{3.91}$$

由于 $f(x)$ 为解析函数, $|f'(x)|$ 在积分回路的各点上都有确定值. 现在如果 $x=x_0$ 点 $\mathrm{Im}[f(x)]$ 沿路径 C 不变, 即 $\mathrm{Re}[f(x)]$ 沿 C 的变化与在该点其他方向变化相比是最快的, 因此路径 C 称为最陡路径. 在 $f'(x)$ 的零点 x_0, 要求 $\mathrm{Im}[f(x)]$ 保持不变的路径, 即最陡路径最少有两条, 相当于 x_0 为 $\mathrm{Re}[f(x)]$ 的鞍点, 取 $\mathrm{Re}[f(x)]$ 之值在 x_0 两边都是下降的, 这样的路径称为最陡下降路径.

下面分析当 $\lambda\to\infty$ 时, 积分 (3.90) 式的渐近展开式. 为简化分析, 令 $g(x)=1$, 相应积分为

$$I(\lambda)=\mathrm{e}^{\lambda f(x_0)}\int_C \mathrm{d}\eta\,\mathrm{e}^{\lambda[f(x_0+\eta)-f(x_0)]}=\mathrm{e}^{\lambda f(x_0)}I_0(\lambda), \tag{3.92}$$

即 $f(x)$ 在 x_0 附近作泰勒级数展开, 即

$$f(x)=f(x_0)+\frac{1}{2}f''(x_0)\eta^2+\sum_{n=3}^{\infty}\frac{f^n(x_0)}{n!}\eta^n. \tag{3.93}$$

选稳相积分回路, 使沿回路 $f'(x_0)=0, f''(x_0)<0$,

$$\mathrm{Im}f(x_0+\eta)=\mathrm{Im}f(x_0)+O(\eta^3),\quad f''(x_0)\eta^2=-|f''(x_0)\eta^2|=-y^2/\lambda. \tag{3.94}$$

沿回路 C 的积分变量作变换

$$\eta\to\frac{y}{\sqrt{\lambda|f''(x_0)|}}$$

得

$$I_0(\lambda)=\sqrt{\frac{2\pi}{\lambda|f''(x_0)|}}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}y}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}y^2}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{1}{m!}\Big(-\sum_{n=3}^{\infty}\frac{\lambda f^n(x_0)}{n!(\lambda|f''(x_0)|)^{\frac{n}{2}}}y^n\Big)^m. \tag{3.95}$$

利用高斯积分公式

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}y}{\sqrt{2\pi}}y^{2n}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}y^2}=(2n-1)!!,\quad \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}y}{\sqrt{2\pi}}y^{2n+1}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}y^2}=0, \tag{3.96}$$

得

$$\begin{aligned}I_0(\lambda)&=\sqrt{\frac{2\pi}{\lambda|f''(x_0)|}}\Big[1+\sum_{n=1}^{\infty}\lambda^{-n}a_{2n}(2n-1)!!\Big]\\&=\sqrt{\frac{2\pi}{\lambda|f''(x_0)|}}\Big[1+\frac{\lambda^{-1}}{24}\Big(\frac{3f''''(x_0)}{f''(x_0)^2}+\frac{5f'''(x_0)^2}{f''(x_0)^3}\Big)+O(\lambda^{-2})\Big].\end{aligned} \tag{3.97}$$

必须强调的是，上面由最陡下降法得到 λ^{-1} 的幂次的渐近展开式，此实际上为 λ^{-1} 的形式幂级数，一般此幂级数发散，但是对足够小的 λ^{-1}，其部分和

$$S_k(\lambda) = \sum_{n=1}^{k} \varphi_n(\lambda)\lambda^{-n}$$

能够满足对任意固定 k

$$\lim_{\lambda\to\infty} \lambda^k(\psi(\lambda) - S_k(\lambda)) = 0,$$

即

$$\psi(\lambda) - S_k(\lambda) = O(\lambda^{-k}). \tag{3.98}$$

但是不能说 $\psi(\lambda) = \lim\limits_{k\to\infty} S_k(\lambda)$，因为此极限可能不存在．对于给定 λ，近似程度不能通过多取项数而无限制改善．而是对于给定 k，当 $\lambda\to\infty$ 时它接近 $\psi(\lambda)$．

以上是最陡下降法的基本思想，通常被称为稳相近似，得到的是渐近展式．

半经典近似 现在将上述稳相近似方法推广到路径积分情况．这时经典轨道相当于鞍点，$\delta S = 0$，偏离稳定点指数衰减，即

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \int_{x_a}^{x_b} \mathrm{D}x(t)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x(t)]_{t_a}^{t_b}}. \tag{3.99}$$

将作用量泛函 $S[x(t)] = \int_{t_a}^{t_b} L(x(t), \dot{x}(t), t)$ 在满足 $\delta S = 0$ 的经典轨道 $x_c(t)$ 周围展开

$$x(t) = x_c(t) + \eta(t), \tag{3.100}$$

其中，$x_c(t)$ 为端点固定 $(x(t_a) = x_a, x(t_b) = x_b)$ 的经典轨道，这时

$$S[x(t)] = S[x_c(t)] + \frac{1}{2}\delta^2 S[x_c(t)] + \frac{1}{6}\delta^3 S[x_c(t)] + \cdots, \tag{3.101}$$

其中，$S[x_c(t)] = S_c(x_b, t_b; x_a, t_a)$ 为端点固定经典轨道的哈密顿主函数，且

$$\delta^2 S[x_c(t)] = \int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}\eta^a(t)\frac{\delta^2 S}{\delta x_c^a(t)\delta x_c^b(t)}\mathrm{d}\eta^b(t).$$

将以上诸式代入 (3.99) 式，可得到费恩曼传播函数在经典轨道附近的稳相展开，相当于按 $\hbar$ 的幂次渐近展开，如

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) \approx \frac{\mathcal{N}}{\sqrt{\det\left(\frac{1}{\hbar}\frac{\delta^2 S[x_c(t)]}{\delta x_c(t_1)\delta x_c(t_2)}\right)}} \times \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S_c(x_b, t_b; x_a, t_a)\right\}[1 + O(\hbar)], \tag{3.102}$$

上式中指数上是经典哈密顿主函数, 而其前置因子为偏离经典轨道各项的贡献 (含 $\hbar$ 项), 称为量子涨落因子 (含 $\delta^2 S$ 对量子涨落的贡献). 与量子力学中的 WKB 近似相比较, (3.102) 式又是路径积分的半经典近似表达式. 进一步利用雅可比场特性, 得到与 (2.143) 式、(2.144) 式相似的 D 维动力学体系的费恩曼传播函数半经典表达式

$$K_{sc}(x_b,t_b;x_a,t_a)=\left(\frac{1}{2\pi\mathrm{i}\hbar}\right)^{\frac{D}{2}}\sum_{\gamma}\left[\det\left(-\frac{\partial^2 S_\gamma}{\partial x_b^j\partial x_a^k}\right)\right]^{\frac{1}{2}}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S_\gamma(x_bt_b;x_at_a)-\mathrm{i}\frac{\pi}{2}\nu_\gamma\right\}, \tag{3.103}$$

其中, 假定存在若干个经典轨道 $x_\gamma(t)$, 它们都是 $\delta S|_\gamma=0$ 的稳定轨道, $S_\gamma\equiv S[x_\gamma(t)]$, $\sum\limits_\gamma$ 为对各不同经典轨道的贡献求和. ν_γ 为二次变分 $\delta^2 S_\gamma$ 的所有负本征值的个数, 即使由 $(x_a,t_a)\to(x_b,t_b)$ 的经典轨道 x_γ 上所有共轭点的阶数之和, (3.103) 式由 Gutzwiller 在 1967 年得出[①], 常称为 van Vleck-Panli-Gutzwiller 公式.

态密度的半经典近似 对保守力体系, 费恩曼传播函数仅依赖时间差 $T=t_b-t_a$, 可进一步经傅里叶变换得到在 E 空间的格林函数

$$\begin{aligned}\mathcal{G}(x_b,x_a,E)&=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^\infty \mathrm{d}t\,e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(E+\mathrm{i}\epsilon)t}K(x_b,x_a,t)\\&=\sum_n\frac{\psi_n(x_b)\psi_n^*(x_a)}{E-E_n-\mathrm{i}\epsilon}\quad(\epsilon\to0^+),\end{aligned} \tag{3.104}$$

在实 E 轴上极点位置及留数给出量子体系的能谱与能量本征态.

利用 δ 分布的分解公式

$$\frac{1}{x\pm\mathrm{i}\epsilon}=P\left(\frac{1}{x}\right)\mp\mathrm{i}\pi\delta(x), \tag{3.105}$$

得到

$$\mathrm{Im}\mathcal{G}(x_b,x_a;E)=-\pi\sum_n\psi_n(x_b)\psi_n^*(x_a)\delta(E-E_n). \tag{3.106}$$

通常将

$$\begin{aligned}\rho(x_b,x_a;E)&=\sum_n\psi_n(x_b)\psi_n^*(x_a)\delta(E-E_n)\\&=-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\mathcal{G}(x_b,x_a;E),\end{aligned} \tag{3.107}$$

称为体系的谱函数矩阵, 而将其对角元取迹得量子态密度的迹等式:

$$\rho(E)=\sum_n\delta(E-E_n)=-\frac{1}{\pi}\int\mathrm{d}x\,\mathrm{Im}\mathcal{G}(x,x;E). \tag{3.108}$$

① Gutzwiller M C. 1967. J. Math. Phys., (8): 1979.

可以利用费恩曼传播函数路径积分的半经典表达式 (3.103) 式并代入 (3.104) 式求得格林函数的半经典表达式

$$\mathcal{G}_{sc}(x_b, x_a; E) = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^{\infty} \mathrm{d}t \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et} K_{sc}(x, x; t). \tag{3.109}$$

再由 (3.108) 式得谱密度的半经典表达式

$$\rho_{sc}(E) = \frac{1}{\pi\hbar}\int_{\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \int_0^{\infty} \mathrm{d}t \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et} K_{sc}(x_b, x_a; t). \tag{3.110}$$

3.3　欧几里得技术, 瞬子积分

作用量与 wick 转动　当哈密顿量不显含时间, 则体系能量守恒, 因此常采用能量表象来处理. 注意到对于稳定系统, 其能量上无限下有界, 因此费恩曼路径积分表示, 常快速振荡. 为分析其收敛性质, 尤其是分析基态性质, 通常采用 Wick 转动过渡到实欧空间较为方便, 即

Wick 转动　　　　$\mathrm{i}t \to \tau,$

$$K(x_b, x_a, \tau) = \langle x_b | \mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}\hat{H}\tau} | x_a \rangle = \int \mathrm{D}x(\tau)\, \mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}S_E[x(\tau)]}. \tag{3.111}$$

例如, 当体系拉氏量

$$L = \frac{m}{2}\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}\right)^2 - V(x),$$

作用量

$$S[x(t)] = \int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t \left[\frac{m}{2}\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}\right)^2 - V(x)\right].$$

对上式作 Wick 转动后, 实欧空间中作用量 $S_E[x(\tau)]$ 应表示为

$$S_E[x(\tau)] = \int_{\tau_a}^{\tau_b} \mathrm{d}\tau \left[\frac{m}{2}\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}\tau}\right)^2 + V(x)\right], \tag{3.112}$$

再取极值得运动方程

$$m\ddot{x} - V'(x) = 0. \tag{3.113}$$

注意, 经 Wick 转动后的运动方程相当于粒子在颠倒势中运动. 以 3.1 节分析的双势阱 (3.57) 式为例, 势为 (图 3.7)

$$V(x) = \frac{g^2}{8}\left(x^2 - a^2\right)^2,$$

与此运动相应欧几里得能量为



$$E = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x). \tag{3.114}$$

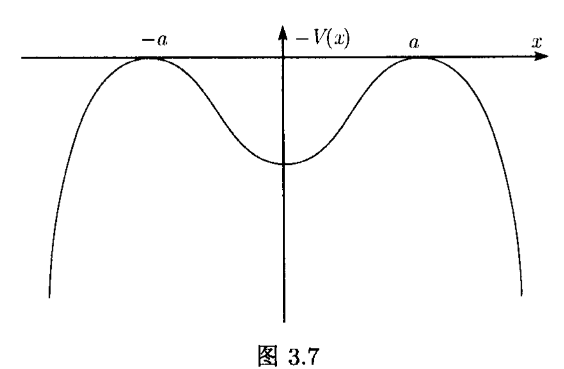


图 3.7

这时运动方程 (3.113) 具有最低能量解 (基态) 为

$$E = 0, \quad x = \pm a. \tag{3.115}$$

另外还存在一能量为零的非平庸解 (习题 3)

$$x_{\text{cl}}(\tau) = \pm a \tanh \frac{\omega(\tau - \tau_c)}{2}, \tag{3.116}$$

其中 ω 为在原势阱底部相应基态频率 $V''(x = \pm a) = g^2a^2 = m\omega^2$, τ_c 为积分常数. 容易检验:

$$\dot{x}_{\text{cl}} = \pm\frac{a\omega}{2}\operatorname{sech}^2\frac{\omega(\tau - \tau_c)}{2} = \pm\frac{a\omega}{2}\left(1 - \frac{x_{cl}^2}{a^2}\right) = \mp\frac{g}{2\sqrt{m}}\left(x_{\text{cl}}^2 - a^2\right)$$

和

$$\ddot{x}_{\text{cl}} = \mp\frac{g}{\sqrt{m}}x_{\text{cl}}\dot{x}_{\text{cl}} = \frac{g^2}{2m}x_{\text{cl}}\left(x_{\text{cl}}^2 - a^2\right) = \frac{1}{m}V'(x_{\text{cl}}),$$

满足运动方程 (3.113). 此解的能量 E 由 (3.114) 式容易得到, 由于

$$\frac{m}{2}\dot{x}_{\text{cl}}^2 = \frac{g^2}{8}\left(x_{\text{cl}}^2 - a^2\right)^2 = V(x_{\text{cl}}), \tag{3.117}$$

所以 $E = 0$, 即此解为具有最低能量的非平庸解, 这时作用量

$$\begin{aligned} S_E[x_{\text{cl}}] &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\tau \left(\frac{m}{2}\dot{x}_{\text{cl}}^2 + V(x_{\text{cl}})\right) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\tau m\dot{x}_{\text{cl}}^2 = m\int_{-a}^{a} \mathrm{d}x\dot{x}_{\text{cl}} \\ &= m\int_{-a}^{a} \mathrm{d}x_{\text{cl}}\left[\mp\frac{\omega}{2a}\left(x_{\text{cl}}^2 - a^2\right)\right] = \mp\frac{m\omega}{2a}\left(\frac{1}{3}x_{\text{cl}}^3 - x_{\text{cl}}a^2\right)\Big|_{-a}^{a} \\ &= \frac{m\omega}{2a}\frac{4a^3}{3} = \frac{2}{3}m\omega a^2 \equiv S_0, \end{aligned} \tag{3.118}$$

与 (3.88) 式引入的 S_0 相同.

瞬子解与基态分裂　此非平庸解 (3.116) 式的存在使得原来两势阱中状态间的隧道效应, 引起原简并基态间相互干涉, 而使能级分裂. 此两解形状如图 3.8(a) 所示. 由于

$$x_{\mathrm{cl}}(\tau \to -\infty) = -a, \quad x_{\mathrm{cl}}(\tau \to +\infty) = +a, \tag{3.119}$$

而相应作用量密度

$$L_E = \frac{1}{2}m\dot{x}_{\mathrm{cl}}^2 + V(x_{cl}) = m\dot{x}_{\mathrm{cl}}^2 = \frac{ma^2\omega^2}{4}\operatorname{sech}^4\frac{\omega(\tau-\tau_c)}{2}.$$

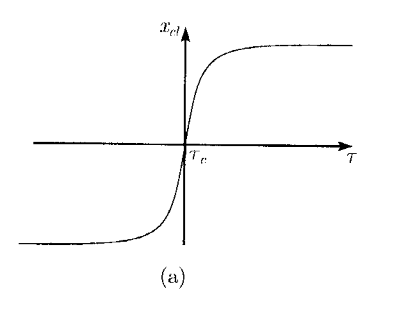
如图 3.8(b) 所示, 由于 L_E 主要在

$$\tau = \tau_c$$

附近, 宽度为

$$\Delta\tau \sim \frac{1}{\omega} = \frac{\sqrt{m}}{ga} \tag{3.120}$$

的区域上取值, 故称为瞬子解, 而 τ_c 为瞬子到达欧几里得势谷的时间. 瞬子解恒正, 无波节, 是系统的基态, $E=0$.



(a)　　　　(b)

图 3.8

瞬子解的路径积分　现在讨论瞬子解对路径积分的贡献.

$$\begin{aligned}K_E(a,-a;T) &= \langle a|\exp\left\{-\frac{1}{\hbar}HT\right\}|-a\rangle = \mathcal{N}\int_{-a}^{a}\mathrm{D}x(\tau)\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}S_E[x(\tau)]}\\ &= \mathcal{N}\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}S_E[x_{\mathrm{cl}}]}\int_{\eta(\tau=-\frac{T}{2})=0}^{\eta(\tau=\frac{T}{2})=0}\mathrm{D}\eta(\tau)\exp\left\{-\frac{1}{2\hbar}\int\mathrm{d}\tau_1\mathrm{d}\tau_2\eta(\tau_1)\right.\\ &\quad\left.\times\frac{\delta^2 S_E[x_{\mathrm{cl}}]}{\delta x_{\mathrm{cl}}(\tau_1)\delta x_{\mathrm{cl}}(\tau_2)}\eta(\tau_2)\right\}(1+O(\hbar))\\ &= \frac{\mathcal{N}}{\sqrt{\det\left(\frac{1}{\hbar}\left[-m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2}+V''(x_{\mathrm{cl}})\right]\right)}}\exp\left\{-\frac{1}{\hbar}S_0\right\}(1+O(\hbar)).\end{aligned} \tag{3.121}$$

这里我们已令 $x(\tau)=x_{\rm cl}(\tau)+\eta(\tau)$, 即采用了稳相近似方法, 且在第一行到第二行的演算中采用了半经典近似, 而 S_0 由 (3.88) 式给出.

下面着重分析利用高斯型积分求解前置涨落因子项:

$$
\begin{aligned}
F(T)=&\int_{\eta(\tau=-\frac{T}{2})=0}^{\eta(\tau=\frac{T}{2})=0}\mathrm{D}\eta(\tau)\exp\left\{-\frac{1}{2\hbar}\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}}\mathrm{d}\tau_1\mathrm{d}\tau_2\eta(\tau_1)\frac{\delta^2 S_E[x_{\rm cl}]}{\delta x_{\rm cl}(\tau_1)\delta x_{\rm cl}(\tau_2)}\eta(\tau_2)\right\}\\
=&\left\{\det\left[\frac{1}{\hbar}\left(-m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2}+V''(x_{\rm cl})\right)\right]\right\}^{-\frac{1}{2}}.
\end{aligned}
\tag{3.122}
$$

首先, 作用于路径 $\eta(\tau)$ 上的涨落算子

$$
\varLambda=-m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2}+V''(x_{\rm cl})
\tag{3.123}
$$

它具有正交归一本征态, 设其完备基为 $\{\varphi_n(\tau)\}$, 即

$$
\varLambda\varphi_n=\lambda_n\varphi_n,\quad \varphi_n\left(\pm\frac{T}{2}\right)=0,
$$

$$
\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}}\varphi_n(\tau)\varphi_m(\tau)\,\mathrm{d}\tau=\delta_{nm}.
\tag{3.124}
$$

将涨落场 $\eta(\tau)$ 用它们展开为

$$
\eta(\tau)=\sqrt{\hbar}\sum_{n\geqslant 0}c_n\varphi_n(\tau),
$$

则完全类似于 (2.85) 式后的讨论得到 $\mathrm{D}\eta(\tau)=N\prod\limits_{n\geqslant 0}\mathrm{d}c_n$, 于是可以证明

$$
F(T)=\int\prod_{n\geqslant 0}\frac{\mathrm{d}c_n}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\sum\limits_{n>0}\lambda_n c_n^2}=\int\frac{\mathrm{d}c_0}{\sqrt{2\pi}}\int\prod_{n>0}\frac{\mathrm{d}c_n}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\sum\limits_{n>0}\lambda_n c_n^2}=\int\frac{\mathrm{d}c_0}{\sqrt{2\pi}}\left(\prod_{n>0}\lambda_n\right)^{-\frac{1}{2}}.
\tag{3.125}
$$

这里由于 $\lambda_0=0$, 即零模态的贡献在指数上消失, 这使得对 $\mathrm{d}c_0$ 的积分无高斯衰减因子, 所以整个积分都会发散, 因而更需小心处理. 注意到问题的时间平移不变性和轨道形状与瞬子的中心位置无关, 故须将涨落因子 $F(T)$ 中对 τ_c 的依赖关系平衡掉, 这相当于场论中的正常化, 关于 $F(T)$ 的推导见下面分析.

单瞬子的传播函数 首先回顾绕瞬子轨道的展开. 瞬子轨道 $x_c(\tau-\tau_0)=a\tanh\dfrac{\omega}{2}(\tau-\tau_0)$, 在其周围的量子涨落为

$$
x(\tau)=x_{\rm cl}(\tau-\tau_c)+\eta(\tau-\tau_c),
\tag{3.126}
$$

将 $\eta(\tau-\tau_0)$ 按涨落方程本征态完备集 $\{\varphi_n(\tau)\}$ 展开, 注意到 (3.118) 式, $\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}\tau m\dot{x}_{\rm cl}^2=S_0$, 涨落算符 Λ 的归一零模解可表示为

$$
\varphi_0(\tau)=\sqrt{\frac{m}{S_0}}\frac{\mathrm{d}x_c}{\mathrm{d}\tau},
\tag{3.127}
$$

因此

$$
\begin{aligned}
x(\tau) &= x_c(\tau-\tau_0)+\sqrt{\hbar}\sum_{n=0}^{\infty}c_n\varphi_n(\tau-\tau_0)\\
&= x_c(\tau-\tau_0)+\sqrt{\frac{\hbar m}{S_0}}c_0\dot{x}_c(\tau-\tau_0)+\sqrt{\hbar}\sum_{n>0}^{\infty}c_n\varphi_n(\tau-\tau_0)\\
&= x_c\left(\tau-\tau_0+\sqrt{\frac{\hbar m}{S_0}}c_0\right)+\sqrt{\hbar}\sum_{n>0}^{\infty}c_n\varphi_n\left(\tau-\tau_0+\sqrt{\frac{\hbar m}{S_0}}c_0\right)+O(\hbar),
\end{aligned}
\tag{3.128}
$$

所以

$$
c_0\sim\sqrt{\frac{S_0}{\hbar m}}\tau_0.
$$

若进一步计入半经典近似主要项, 则有

$$
\frac{\mathrm{d}c_0}{\mathrm{d}\tau_0}=\sqrt{\frac{S_0}{\hbar m}}(1+O(\hbar)).\tag{3.129}
$$

将以上结果代入 (3.125) 式并进一步代入 (3.121) 式, 则单瞬子的费恩曼传播函数为

$$
\begin{aligned}
K_{E1}(a,-a;T) &= \langle a\mid \mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}HT}\mid -a\rangle_1\\
&= \frac{\mathcal{N}\left(\dfrac{S_0}{m}\right)^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}S_0}}{\sqrt{\det'\left[\dfrac{1}{\hbar}\left(-m\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2}+V''(x_{\mathrm{cl}})\right)\right]}}\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}}\mathrm{d}\tau_0+O(\hbar)
\end{aligned}
\tag{3.130}
$$

(3.130) 式左端下标 1 表示仅考虑单瞬子的贡献. det′ 代表将零模解去掉后, 仅考虑非零模贡献 (即已经正常化, 去掉了奇异). 下面首先计算 det′, 然后再分析多瞬子贡献, 最后得双势阱中基态能级分裂.

瞬子轨道的涨落分析　定义在瞬子解 (3.116) 式周围的涨落算子

$$
\Lambda\equiv -m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2}+V''(x_c(\tau))=-m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2}+\frac{m\omega^2}{2}\left(3\tanh^2\frac{\omega\tau}{2}-1\right),\tag{3.131}
$$

取两端固定边界条件, 其本征值方程 (也称为涨落方程)

$$
\begin{cases}
\Lambda\varphi_n(\tau)=\lambda_n\varphi_n(\tau),\\
\varphi_n\left(-\dfrac{T}{2}\right)=0=\varphi_n\left(\dfrac{T}{2}\right),\quad \text{边界条件}.
\end{cases}
\tag{3.132}
$$

先取 $\left[-\dfrac{T}{2},\dfrac{T}{2}\right]$ 为有限区间并取周期性边界条件, 则解为离散谱. Λ 为厄米算子,

其本征态集合 $\{\varphi_n, n=0,1,\cdots\}$ 正交归一完备.

雅可比场是沿测地线任意变分中使 $\delta^2 S$ 取最小正值的场, 满足给定初始条件的如下雅可比方程 (也称为偏离方程):

$$\begin{cases} \Lambda\eta_\lambda(\tau)=\lambda\eta_\lambda(\tau), \\ \eta_\lambda(\tau_a)=0, \quad \dot{\eta}_\lambda(\tau_a)=\dfrac{1}{m}\neq 0, \quad \text{初始条件}. \end{cases} \tag{3.133}$$

偏离方程一般为连续谱 λ, 其初始条件 $\eta_\lambda\left(-\dfrac{T}{2}\right)=0$, 而一般 $\eta_\lambda\left(\dfrac{T}{2}\right)\neq 0$, 仅当

$$\lambda=\lambda_n, \quad \eta_{\lambda=\lambda_n}\left(\frac{T}{2}\right)=0 \tag{3.134}$$

证明很简单, 做运算 $-\eta_\lambda\cdot(3.132)$式$+\varphi_n\cdot(3.133)$式, 消去势能项, 得

$$\eta_\lambda m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2}\varphi_n-\varphi_n m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2}\eta_\lambda=(\lambda-\lambda_n)\varphi_n\eta_\lambda,$$

对上式积分得

$$(\lambda-\lambda_n)\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}}\mathrm{d}\tau\varphi_n(\tau)\eta_\lambda(\tau)=m\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}}\mathrm{d}\tau\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}(\eta_\lambda\dot{\varphi}_n-\varphi_n\dot{\eta}_\lambda)=m\eta_\lambda\left(\frac{T}{2}\right)\dot{\varphi}_n\left(\frac{T}{2}\right), \tag{3.135}$$

上式两端仅当 $\lambda=\lambda_n$ 时才为零, 即 (3.134) 式.

涨落算子的奇异性分析 下面将它们与运动方程的平庸解 $x_c^0=a$ 及其周围涨落算子

$$\Lambda^0=-m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2}+V''(x_c^0)=-m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2}+m\omega^2 \tag{3.136}$$

进行比较. Λ^0 即通常谐振子算子, 其本征值恒正. 可类似 (3.132) 式、(3.133) 式分析相应的涨落方程

$$\Lambda^0\psi_n(\tau)=\lambda_n^0\psi_n(\tau), \quad \psi_n\left(-\frac{T}{2}\right)=\psi_n\left(\frac{T}{2}\right)=0 \tag{3.137}$$

和偏离方程

$$\Lambda^0 y_\lambda(\tau)=\lambda y_\lambda(\tau), \quad y_\lambda\left(-\frac{T}{2}\right)=0, \quad \dot{y}_\lambda\left(-\frac{T}{2}\right)=\frac{1}{m}\neq 0. \tag{3.138}$$

那么, 可类似 (2.109) 式 ~(2.113) 式步骤来计算两行列式之比

$$\frac{\det(\Lambda-\lambda)}{\det(\Lambda^0-\lambda)}=\frac{\prod_n(\lambda_n-\lambda)}{\prod_n(\lambda_n^0-\lambda)}=\frac{\eta_\lambda\left(\dfrac{T}{2}\right)}{y_\lambda\left(\dfrac{T}{2}\right)}, \tag{3.139}$$

这个方程左边为 λ 的亚纯函数, 单零点在 λ_n, 单极点在 λ_n^0, 右边具有相同性质. 且方程两边当 $\lambda\to\infty$ 时均趋于 1. 对于 λ 复平面上的解析函数, 当两边具有相同解析结构, 则必相等.

(3.139) 式中令 $\lambda=0$, 并将左端 Λ 的最小本征值 λ_0, 抽出搬至右端, 即引入

$$Q\equiv\frac{\det'\Lambda}{\det\Lambda^0}=\frac{\eta_0\left(\frac{T}{2}\right)}{\lambda_0 y_0\left(\frac{T}{2}\right)}\ . \tag{3.140}$$

其中, λ_0 为 Λ 的最小本征值, 当 $T\to\infty$ 时最终趋于 0, 对此将在本节最后给出其取值的渐近表达式, 见 (3.151) 式. 现在先分析 $y_0\left(\frac{T}{2}\right)$ 与 $\eta_0\left(\frac{T}{2}\right)$. $y_0(\tau)$ 满足 (3.138) 式, 其解为

$$y_0(\tau)=\frac{1}{\omega}\sinh\omega\left(\tau+\frac{T}{2}\right),$$

故有

$$y_0\left(\frac{T}{2}\right)=\frac{1}{\omega}\sinh\omega T. \tag{3.141}$$

再看解 $\eta_0(\tau)$, 它满足 (3.133) 式, 则

$$\left[-m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2}+\frac{m\omega^2}{2}\left(3\tanh^2\frac{\omega\tau}{2}-1\right)\right]\eta_0(\tau)=0. \tag{3.142}$$

由 (3.127) 式知表示上面方程的一零模解可表示为

$$\varphi_0(\tau)=\sqrt{\frac{m}{S_0}}\frac{\mathrm{d}x_c(\tau)}{\mathrm{d}\tau}=\sqrt{\frac{m}{S_0}}\left(\frac{\omega a}{2}\right)\mathrm{sech}^2\frac{\omega\tau}{2}\ \underset{\tau\to\pm\frac{T}{2}}{\longrightarrow}\ 2\omega a\sqrt{\frac{m}{S_0}}\mathrm{e}^{-\omega|T|}\equiv\alpha\mathrm{e}^{-\omega|T|}. \tag{3.143}$$

注意到 $\tau\to\pm\frac{T}{2}$ 时, $\Lambda\to\Lambda^0=-m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2}+m\omega^2$, 所以 (3.127) 式还有另一解 $\tilde{\varphi}_0(\tau)$. 求 φ_0 与 $\tilde{\varphi}_0$ 的 Wronskian 归一常数

$$W[\varphi_0,\tilde{\varphi}_0]=\varphi_0\dot{\tilde{\varphi}}_0-\tilde{\varphi}_0\dot{\varphi}_0=2\omega\alpha^2,$$

则

$$\tilde{\varphi}_0(\tau)\ \underset{\tau\to\pm\frac{T}{2}}{\longrightarrow}\ \pm\alpha\mathrm{e}^{\omega|\tau|}\ . \tag{3.144}$$

可由上两解线性组合得到满足偏微方程 (3.133) 和初始条件 $\eta_0\left(-\frac{T}{2}\right)=0$, $\dot{\eta}_0\left(-\frac{T}{2}\right)=\frac{1}{m}\neq 0$ 的解, 即

$$\eta_0(\tau)=\frac{1}{2\omega\alpha}\left(\mathrm{e}^{\omega T/2}\varphi_0(\tau)+\mathrm{e}^{-\omega T/2}\tilde{\varphi}_0(\tau)\right). \tag{3.145}$$

因此

$$\eta_0\left(\frac{T}{2}\right)=\frac{1}{\omega}\ . \tag{3.146}$$

最后求 λ_0, 它是涨落方程的最低本征值, 且要求当 $T\to\infty$, $\lambda_0\to 0$.

考虑使 $\delta^2 S$ 取最小正值的雅可比场

$$\Lambda\eta_\lambda(\tau) = \lambda\eta_\lambda(\tau),$$

当 $\lambda \ll 1$, 则

$$\Lambda\eta_\lambda(\tau) = \lambda\eta_0(\tau) + O(\lambda^2), \tag{3.147}$$

其中, $\eta_0(\tau)$ 如 (3.145) 式为雅可比场零模解, 而相应偏离方程的格林函数

$$G(\tau,\tau') = \frac{1}{2m\omega\alpha^2}\Theta(\tau-\tau')(\varphi_0(\tau)\tilde{\varphi_0}(\tau') - \tilde{\varphi_0}(\tau)\varphi_0(\tau')). \tag{3.148}$$

这样

$$\begin{aligned}\eta_\lambda(\tau) &\approx \eta_0(\tau) + \lambda\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \mathrm{d}\tau' G(\tau,\tau')\eta_0(\tau') \\ &= \eta_0(\tau) + \frac{\lambda}{2m\omega\alpha^2}\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \mathrm{d}\tau'(\varphi_0(\tau)\tilde{\varphi_0}(\tau') - \tilde{\varphi_0}(\tau)\varphi_0(\tau'))\eta_0(\tau'),\end{aligned} \tag{3.149}$$

因此

$$\begin{aligned}\eta_\lambda\left(\frac{T}{2}\right) &= \eta_0\left(\frac{T}{2}\right) + \frac{\lambda}{2m\omega\alpha^2}\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \mathrm{d}\tau'\left(\mathrm{e}^{-\omega\frac{T}{2}}\tilde{\varphi_0}(\tau') - \mathrm{e}^{\omega\frac{T}{2}}\varphi_0(\tau')\right) \\ &\quad\times\frac{1}{2\omega\alpha}\left(\mathrm{e}^{\omega\frac{T}{2}}\varphi_0(\tau) + \mathrm{e}^{-\omega\frac{T}{2}}\tilde{\varphi_0}(\tau)\right) \\ &= \eta_0\left(\frac{T}{2}\right) + \frac{\lambda}{4m\omega^2\alpha^2}\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \mathrm{d}\tau'\left(\mathrm{e}^{-\omega T}\tilde{\varphi_0}^2(\tau') - \mathrm{e}^{\omega T}\varphi_0^2(\tau')\right) \\ &\xrightarrow[T\to\infty]{} \frac{1}{\omega} - \frac{\lambda}{4m\omega^2\alpha^2}\mathrm{e}^{\omega T},\end{aligned} \tag{3.150}$$

所以满足 $\eta_{\lambda_0}\left(\frac{T}{2}\right) = 0$ 的值为

$$\lambda_0 = 4m\omega\alpha^2\mathrm{e}^{-\omega T} \tag{3.151}$$

最终将 (3.141) 式、(3.146) 式及 (3.151) 式代入 (3.140) 式得

$$Q = \frac{\det'\Lambda}{\det\Lambda^0} = \frac{1}{\lambda_0\sinh\omega T} \xrightarrow{T\to\infty} \frac{1}{2m\omega\alpha^2}, \quad \alpha = 2\omega a\sqrt{\frac{m}{S_0}}. \tag{3.152}$$

到此, 本节介绍的方法中, 一方面用集体坐标法处理零模问题 (τ_0 作为瞬子的集体坐标), 另一方面对非零模形成的行列式 $\det'\Lambda$, 将它与已知精确解算子的 $\det\Lambda^0$ 作比 Q 来分析, 最终解决问题. 利用这一方法, 还可进一步分析因瞬子解引起的一些物理现象, 如基态能级分裂、亚稳态衰变等, 在下两节讨论.

3.4　双势阱中基态能级分裂问题

平庸解的量子配分函数　当分析保守系体系基态能级, 可利用虚时配分函数

$$Z(T)=\operatorname{tr}\left(\mathrm{e}^{-\frac{HT}{\hbar}}\right)=\sum_n \mathrm{e}^{-\frac{E_nT}{\hbar}}\xrightarrow{T\to\infty}\mathrm{e}^{-\frac{E_0T}{\hbar}}. \tag{3.153}$$

对于双势阱

$$V(x)=\frac{m\omega^2}{8a^2}\left(x^2-a^2\right)^2\quad(a>0),$$

下面用路径积分计算虚时配分函数:

$$Z(T)=\int_{x\left(\frac{T}{2}\right)=x\left(-\frac{T}{2}\right)}\mathrm{D}x(\tau)\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}S_E[x(\tau)]}. \tag{3.154}$$

其中,

$$S_E[x(\tau)]=\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}}\mathrm{d}\tau\left(\frac{1}{2}m\dot{x}^2+V(x)\right). \tag{3.155}$$

由 $\delta S=0$ 得其极值 (经典运动方程)

$$-m\ddot{x}(\tau)-\frac{m\omega^2}{2}x(\tau)+\frac{m\omega^2}{2a^2}x(\tau)^3=0, \tag{3.156}$$

此方程具有平庸解

$$x_c(\tau)=\pm a,\quad S_E[x_c(\tau)]=0. \tag{3.157}$$

在平庸解 $x_c=a$ 周围的涨落算子 (δ^2S 算子)

$$-m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2}+V''(x_c)=-m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2}+m\omega^2 \tag{3.158}$$

相当于谐振子方程, 其本征值恒正. 此平庸解对应的费恩曼传播函数为

$$\begin{aligned}K_0&=\langle a|\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}HT}|a\rangle_0=\langle -a|\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}HT}|-a\rangle\\&=\mathcal{N}\int_a^a\mathrm{D}x(\tau)\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}S_E[x(\tau)]}\\&=\frac{\mathcal{N}}{\sqrt{\det\left(-m\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2}+m\omega^2\right)}}.\end{aligned} \tag{3.159}$$

注意到谐振子的配分函数

$$\begin{aligned} Z_H(T) &= \int \mathrm{d}x K_H(x,T;x,0) \\ &= \int \mathrm{d}x \left(\frac{m\omega}{2\pi\hbar \sinh \omega T}\right)^{\frac{1}{2}} \mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}\frac{m\omega}{2\sinh\omega T}(\cosh\omega T-1)x^2} \\ &= \left(\frac{m\omega}{2\pi\hbar\sinh\omega T}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\pi\hbar\sinh\omega T}{m\omega(\cosh\omega T-1)}\right)^{\frac{1}{2}} \\ &= \frac{1}{2\sinh\frac{\omega T}{2}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{\det\left(-m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2}+m\omega^2\right)}}, \end{aligned} \tag{3.160}$$

由此得

$$K_0 = \frac{\mathcal{N}}{\sqrt{\det\left(-m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2}+m\omega^2\right)}} = \frac{\mathcal{N}}{2\sinh\frac{\omega T}{2}} \xrightarrow[T\to\infty]{} \mathcal{N}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\omega T}, \tag{3.161}$$

因此在双势阱中最低基态能量 (双重简并) 为

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega. \tag{3.162}$$

瞬子解的量子配分函数 运动方程 (3.156) 式还存在很多具有相同边界条件的非平庸解, 它们对配分函数的计算会有贡献, 使各本征态能级发生迁移, 造成基态能级分裂. 这正是下面着重分析的问题.

首先分析上节讨论的瞬子解, 它是满足运动方程 (3.156) 式的非平庸解 ((3.116) 式)

$$x_c(\tau) = \pm a \tanh\frac{\omega(\tau-\tau_0)}{2},$$

其相应作用量 (如 (3.118) 式)

$$\begin{aligned} S_E[x_c(\tau)] &= \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \mathrm{d}\tau \left(\frac{m}{2}\dot{x}_c^2 + V(x_c)\right) = \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \mathrm{d}\tau 2V(x_c) \\ &= m\int_{-a}^{a} \mathrm{d}x \dot{x}_c = \int_{-a}^{a} \mathrm{d}x\sqrt{2mV(x)} = \frac{2}{3}m\omega a^2 \equiv S_0. \end{aligned} \tag{3.163}$$

令 K_1 表示单瞬子解对应的费恩曼传播函数, 则

$$\begin{aligned} K_1 &= \langle a \mid \mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}HT} \mid -a\rangle_1 = \langle -a \mid \mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}HT} \mid a\rangle_1 \\ &= \mathcal{N}' \int_{-a}^{a} \mathrm{D}x(\tau)\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}S_E[x(\tau)]}. \end{aligned} \tag{3.164}$$

在瞬子解背景下的涨落方程

$$\Lambda\eta_0(\tau)=\left[-m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2}+\frac{m\omega^2}{2}\left(3\tanh^2\frac{\omega\tau}{2}-1\right)\right]\eta_0(\tau)=0\ . \tag{3.165}$$

具有非平庸零模解

$$\eta_0(\tau)=\dot{x}_c(\tau)=\pm\frac{a\omega}{2}\mathrm{sech}^2\frac{\omega}{2}(\tau-\tau_0). \tag{3.166}$$

这样, 一方面用瞬子中心坐标 τ_0 (集体坐标) 表达零模解对 K_1 路径积分的贡献, 另一方面利用 $\dfrac{K_1}{K_0}$ 来计算涨落算子 Λ 的非零模部分对路径积分贡献, 即

$$\begin{aligned}R=\frac{K_1}{K_0}&=\frac{\langle a\mid \mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}HT}\mid -a\rangle_1}{\langle a\mid \mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}HT}\mid a\rangle_0}=\mathrm{e}^{-\frac{S_0}{\hbar}}\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}}\frac{\mathrm{d}c_0}{\sqrt{2\pi}}\frac{\sqrt{\det\left(-m\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2}+m\omega^2\right)}}{\sqrt{\det'\Lambda}}\\&=\mathrm{e}^{-\frac{S_0}{\hbar}}Q^{-\frac{1}{2}}\left(\frac{S_0}{2\pi\hbar m}\right)^{\frac{1}{2}}\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}}\mathrm{d}\tau_0\\&=\left(\frac{2m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}2a\omega\mathrm{e}^{-\frac{S_0}{\hbar}}T.\end{aligned} \tag{3.167}$$

瞬子对的传播函数　在区间 $\left[-\dfrac{T}{2},\dfrac{T}{2}\right]$, 当 $T\to\infty$ 时, 运动方程 (3.156) 式还可能存在很多具有相同边界条件的非平庸解, 例如, 反瞬子-瞬子对

$$x_c(\tau)=a^2\tanh\frac{\omega(\tau-\tau_0)}{2}\tanh\frac{\omega(\tau-\tau_0')}{2}\quad(\tau_0>\tau_0') \tag{3.168}$$

其中, τ_0 为瞬子解中心位置, τ_0' 为反瞬子解中心位置, 如图 3.9 所示.

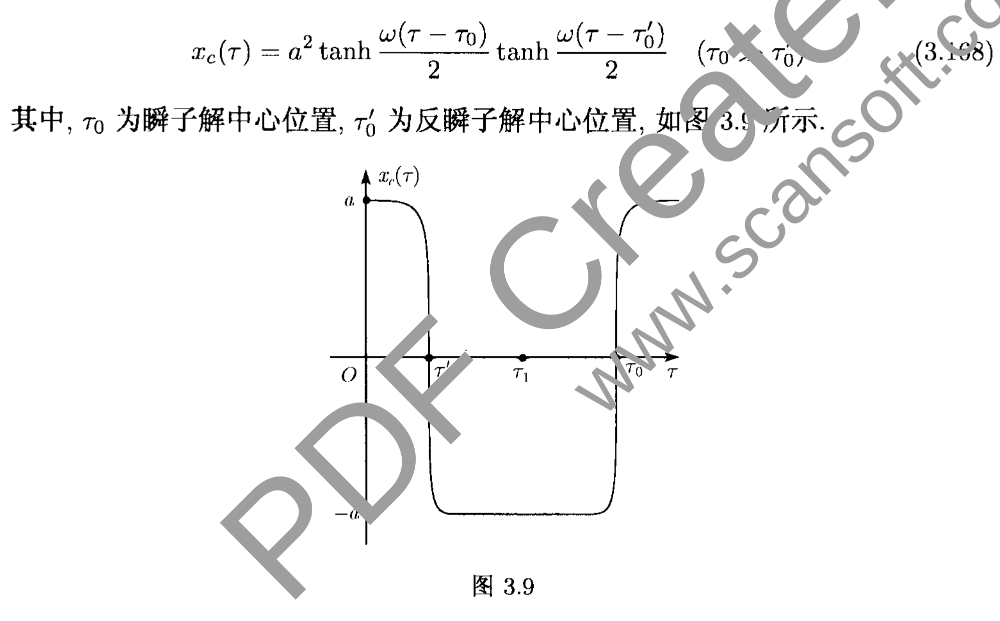


图 3.9

注意到瞬子特点, 其坐标 $x_c(\tau)$ 在长区间 $\left[-\dfrac{T}{2}, \dfrac{T}{2}\right]$ 中都处在 $\pm a$ 的位置, 仅在瞬间由 $-a$ 跳到 a. 如图 3.9, 当 $\tau_0 \gg \tau_0'$ 二者中心距离很远, 几乎没有叠加, 这时称其为稀薄气体近似. 在这种条件下, 反瞬子-瞬子对对应的费恩曼传播函数可表示为

$$
\begin{aligned}
K_2 &\equiv \langle a \mid \mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}HT} \mid a\rangle_2 \\
&= \langle a \mid \mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}H\left(\frac{T}{2}-\tau_1\right)} \mid -a\rangle_1 \langle -a \mid \mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}H\left(\tau_1+\frac{T}{2}\right)} \mid a\rangle_1,
\end{aligned}
\tag{3.169}
$$

另外可将平庸解的 (3.157) 式贡献表示为

$$
\begin{aligned}
K_0 &= \langle -a|\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}HT}| -a\rangle_0 \\
&= \langle -a|\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}H\left(\frac{T}{2}-\tau_1\right)}| -a\rangle_0 \langle -a|\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}H\left(\tau_1+\frac{T}{2}\right)}| -a\rangle_0 \equiv A\cdot B.
\end{aligned}
\tag{3.170}
$$

上两式对比可得

$$
\begin{aligned}
K_2 &= \frac{1}{K_0}\langle a|\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}H\left(\frac{T}{2}-\tau_1\right)}| -a\rangle_1 \cdot B \cdot A \cdot \langle -a|\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}H\left(\tau_1+\frac{T}{2}\right)}|a\rangle_1 \\
&= \frac{1}{2!}\frac{1}{K_0}K_1\widetilde{K}_1 = \frac{1}{2!}R^2K_0.
\end{aligned}
$$

关于上式第二等式的推导, 权重因子 $\dfrac{1}{2!}$ 的出现, 是由于我们采用了稀薄气体近似, 注意到 $-\dfrac{T}{2} < \tau_0' < \tau_1 < \tau_0 < \dfrac{T}{2}$, 由于中间位置是任意的, 在对所有轨道求和也涉及对这些位置的积分, 且由于被积函数与 τ_0', τ_1, τ_0 的位置无关, 考虑到对反瞬子-瞬子的中心坐标位置的积分

$$
\int_{\tau_a}^{\tau_b}\mathrm{d}\tau_0\int_{\tau_a}^{\tau_0}\mathrm{d}\tau_0' = \frac{1}{2!}\int_{\tau_a}^{\tau_b}\int_{\tau_a}^{\tau_b}\mathrm{d}\tau_0\mathrm{d}\tau_0' = \frac{T^2}{2!}
\tag{3.171}
$$

因而得到以上结果.

多瞬子的传播函数 下面进一步分析 n 个反瞬子-瞬子对的贡献, 由于各反瞬子-瞬子对的中心位置是任意的, 所以有

$$
K_{2n} = \frac{1}{(2n)!}R^{2n}K_0 .
\tag{3.172}
$$

在稀薄气体近似下, 即忽略各反瞬子与瞬子间的相互作用, 则考虑多重反瞬子-瞬子对的贡献后, 完整的费恩曼核为

$$
\begin{aligned}
K(T) &= \sum_{n=0}^{\infty}K_{2n} = \cosh RK_0 = \frac{K_0}{2}\left(\mathrm{e}^R + \mathrm{e}^{-R}\right) \\
&\underset{T\to\infty}{=} \frac{1}{2}\mathcal{N}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\omega T}\left(\mathrm{e}^R + \mathrm{e}^{-R}\right).
\end{aligned}
\tag{3.173}
$$

由于多重反瞬子-瞬子对的影响, 将造成基态能级分裂, 对于最低两能级的分裂结果为: 基态为对称态 $|+\rangle$, 没有节点, 基态能量

$$E_+ = \frac{\hbar\omega}{2} - \frac{\hbar R}{T}, \tag{3.174}$$

第一激发态为反对称态 $|-\rangle$, 其能量

$$E_- = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar R}{T}, \tag{3.175}$$

故由于隧道效应引起双势阱基态能级分裂为

$$\Delta E = \frac{2\hbar R}{T} = 4a\omega(2m\hbar\omega)^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-\frac{S_0}{\hbar}}. \tag{3.176}$$

显然由路径积分稳相近似得到的结果与通常量子力学 WKB 近似的结果 (3.88) 式相符合, 但需要特别强调的是, 这里考虑了多重瞬子-反瞬子的贡献, 故更精确.

3.5 亚稳态的衰变

隧穿效应的路径积分 本节利用路径积分稳相近似方法来分析量子隧穿起重要作用的另一现象 —— 亚稳态的衰变.

设势 $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 - \frac{1}{3}\mu x^3$ 其形状如图 3.10(a) 所示, 并有如下特点:

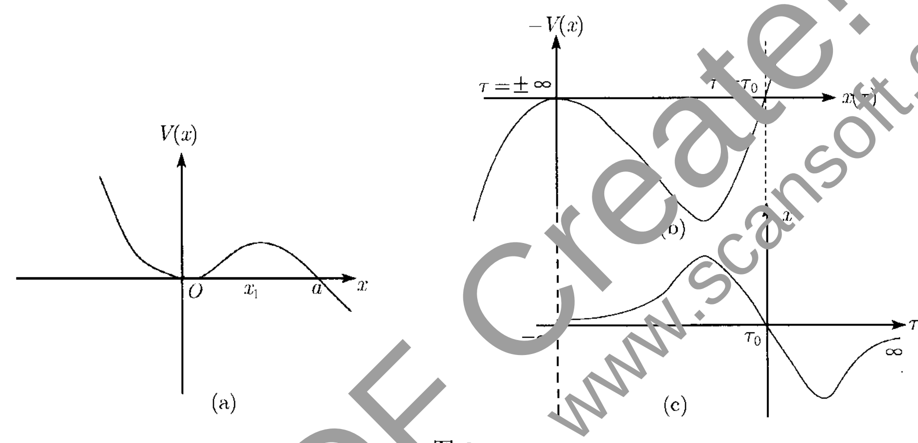


图 3.10

(1) $V(x)$ 有两个零点: $0, a = \frac{3}{2}\frac{m\omega^2}{\mu}$;

(2) $V'(x) = m\omega^2 x - \mu x^2$, 其极值点: 0, $x_1 = \frac{m\omega^2}{\mu} = \frac{2}{3}a$, $V_0 = V(x_1) = \frac{2}{27}m\omega^2a^2$;

(3) $V''(x) = m\omega^2 - 2\mu x$.

显然 $x = 0$ 点为势的极值点, 但并非绝对极小, 如图 3.10(a) 所示, 由于量子隧道效应, 粒子有一定概率离开势阱跑到 $x > a$ 点, 对此可用路径积分稳相近似来计算其衰变率. 为方便, 采用 Wick 转动将路径积分转换到实欧空间, 分析欧氏空间上的配分函数, 如同 3.4 节 (3.154) 式

$$\begin{aligned} Z_E(T) &= \mathrm{tr}(\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}HT}) \\ &= \int \mathrm{D}x(\tau)\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}}\mathrm{d}\tau\left(\frac{1}{2}m\dot{x}^2+V(x)\right)}. \end{aligned} \tag{3.177}$$

经典哈密顿主函数 由 $\delta S = 0$ 得在颠倒势 (图 3.10(b)) 的经典运动方程 $m\ddot{x} - V'(x) = 0$, 即

$$m\ddot{x} - m\omega^2 x + \mu x^2 = 0, \tag{3.178}$$

其初积分为

$$\frac{1}{2}m\dot{x}^2 = V(x) + \mathrm{const}, \tag{3.179}$$

取满足在 $x = 0$ 点, 动能 = 势能 =0 的解, 即 (3.179) 式 const=0. 因为

$$\int \mathrm{d}\tau = \sqrt{m}\int\frac{\mathrm{d}x}{\sqrt{2V}} = \int\frac{\mathrm{d}x}{\left(\omega^2x^2 - \frac{2\mu}{3m}x^3\right)^{\frac{1}{2}}} = \frac{1}{\omega}\int\frac{\mathrm{d}x}{x\left(1-\frac{x}{a}\right)^{\frac{1}{2}}}, \tag{3.180}$$

故得非平庸解

$$x_c(\tau - \tau_0) = \frac{a}{\cosh^2\frac{\omega}{2}(\tau-\tau_0)}, \quad 0 \leqslant x \leqslant a. \tag{3.181}$$

这相当于在颠倒势中经典运动的回弹解, 即 $(T \to \infty)$

$$\Rightarrow \begin{cases} \tau \to -\frac{T}{2}, & x = 0, \\ \tau = \tau_0, & x(\tau_0) = a, \quad \dot{x}(\tau_0) = 0, \\ \tau \to \frac{T}{2}, & x = 0. \end{cases}$$

其平移零模 (即满足涨落方程的零模解):

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}x_c(\tau-\tau_0) = -\frac{a\omega\sinh\frac{\omega}{2}(\tau-\tau_0)}{\cosh^3\frac{\omega}{2}(\tau-\tau_0)}, \tag{3.182}$$

易验证满足 $\frac{1}{2}m\dot{x}_c^2 = V(x_c)$, 很容易求出

$$\begin{aligned} S_E(x_c) &= \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \mathrm{d}\tau \Big(\frac{m}{2}\dot{x}_c^2 + V(x_c)\Big) = m\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \mathrm{d}\tau \dot{x}_c^2 \\ &= 2a^2\omega^2 m \int_0^\infty \mathrm{d}\tau \frac{\sinh^2 \frac{\omega}{2}(\tau-\tau_0)}{\cosh^3 \frac{\omega}{2}(\tau-\tau_0)} = \frac{8}{15}m\omega a^2. \end{aligned} \tag{3.183}$$

量子涨落分析　$\delta^2 S$ 的本征方程 (涨落方程) 为

$$\Big(-m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2} + V''(x_c)\Big)\varphi_n = \lambda_n \varphi_n, \quad \varphi_n\Big(-\frac{T}{2}\Big) = 0 = \varphi_n\Big(\frac{T}{2}\Big), \tag{3.184}$$

所以, 利用稳相近似可将 (3.177) 式改写成

$$\begin{aligned} Z_E(T) &= \mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}S_E(x_c)} \int \mathrm{D}\eta(\tau) \mathrm{e}^{-\frac{1}{2\hbar}\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \mathrm{d}\tau \eta(\tau)\left(-m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2} + V''(x_c)\right)\eta(\tau)} (1 + O(\hbar)) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\det\Big(-m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2} + V''(x_c)\Big)}} \mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}S_E(x_c)}(1 + O(\hbar)). \end{aligned} \tag{3.185}$$

经典解的稳定条件要求, 将回弹解 (3.181) 式代入涨落方程

$$\Big(-m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2} + V''(x_c)\Big)y(t) = \lambda y(t), \tag{3.186}$$

即

$$\left[-m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2} + m\omega^2 - 3\frac{m\omega^2}{a}\frac{a}{\cosh^2 \frac{\omega}{2}(\tau-\tau_0)}\right]y(\tau) = \lambda y(\tau). \tag{3.187}$$

令 $z = \frac{\omega}{2}(\tau - \tau_0)$, 则 (3.187) 式可化为

$$\Big(-m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} + 4 - \frac{12}{\cosh^2 z}\Big)y(z) = \frac{4\lambda}{m\omega^2}y(z), \tag{3.188}$$

这正是具有 Poschl-Teller 势的薛定谔方程, 由于在 $z \to \pm\infty$ 处, 势指数衰减为零, 故方程 (3.188) 式具有离散谱与连续谱 (见本节后附录). 另外, 可将 (3.187) 式写为

$$\left[m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} + \xi + \frac{l(l+1)}{\cosh^2 z}\right]y(z) = 0, \quad \xi = \frac{4\lambda}{m\omega^2} - 4, \quad l = 3. \tag{3.189}$$

该方程具有三个离散谱, 即

$$\lambda_{-1} = -\frac{5}{4}m\omega^2, \quad \lambda_0 = 0, \quad \lambda_1 = \frac{3}{4}m\omega^2, \tag{3.190}$$

基态 (谱 λ_{-1}) 无节点, 第一激发态 (谱 λ_0) 有一节点, 第二激发态 (谱 λ_1) 有两节点. 另外具有连续谱

$$\lambda_k = m\omega^2 + k^2, \quad k^2 > 0.$$

前面曾指出经典运动方程的非平庸解 $x_c(\tau)$ 对时间的导数 $\dot{x}_c(\tau)$(见 (3.182) 式), 即为涨落方程 (3.187) 式的平移零模解: $y_0(\tau) = \dot{x}_c(\tau)$, 满足

$$\left[-m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2} + m\omega^2 - 3\frac{m\omega^2}{\cosh^2\dfrac{\omega}{2}(\tau-\tau_0)}\right]y_0(\tau) = 0.$$

如图 3.10(c) 所示, 此零模解 $y_0(\tau) = \dot{x}_c(\tau)$ 在 $\tau = \tau_0$ 处有节点, 这表明方程 (3.187) 还存在能量为负值的无节点的解, 即如 (3.187) 式 $\lambda_{-1} = -\dfrac{5}{4}m\omega^2$ 的本征态

$$y_{-1}(\tau).$$

需要注意的是, 由图 3.10(a) 中势的形状看出, 势垒穿透将使原居阱底的态变得不再稳定, 涨落方程不仅具有零模, 而且有负模, 可类似本节对多重反瞬子-瞬子对对路径积分影响的讨论, 分析多重回弹解瞬子解的影响. 现在涨落算子 (3.187 式)

$$\Lambda = -m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2} + m\omega^2 - \frac{3m\omega^2}{\cosh^2\dfrac{\omega}{2}(\tau-\tau_0)}$$

$\det\Lambda=0$, 将去掉零模的 $\det'\Lambda$ 与 $T\to\infty$ 时平庸涨落算子

$$\Lambda^0 = -m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2} + m\omega^2$$

比较, 计算

$$K = \sqrt{\frac{S_0}{2\pi m}}\left(\frac{\det\Lambda^0}{\det'\Lambda}\right)^{\frac{1}{2}},$$

Λ^0 所有本征值恒正, Λ 有零模 $x_c(\tau)$, 使 $\det\Lambda^0$ 比 $\det'\Lambda$ 多一本征值, 故 K 的量纲 $\sim[\tau]^{-1}$. 由于多重回弹瞬子的存在, 使

$$\begin{aligned} Z_E(T) &= \mathrm{e}^{-T\omega_0/2}\sum_n\int_0^T \mathrm{d}\tau_n\int_0^{\tau_n}\mathrm{d}\tau_{n-1}\cdots\int_0^{\tau_2}\mathrm{d}\tau_1(K\mathrm{e}^{-S_0})^n \\ &= \mathrm{e}^{-T(\frac{\omega_0}{2}-K\mathrm{e}^{-S_0})} \end{aligned}$$

似乎回弹瞬子只对能量有小修正, $\Delta E = -K\mathrm{e}^{-S_0}$, 实际由于 $\det'\Lambda$ 中含有负模, 系数 k 是虚数.

因此计算出的基态能量 E_0 有虚部, 而此虚部正决定了态的衰变率, 即

$$\Gamma = 2\mathrm{Im}E_0 = 2\hbar K\mathrm{e}^{-\frac{S_0}{\hbar}}. \tag{3.191}$$

附录：具有 Poschl-Teller 势的薛定谔方程解

具有 Poschl-Teller 势的薛定谔方程

$$\left[m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2}+\xi+\frac{l(l+1)}{\cosh^2 z}\right]\psi(z)=0 \tag{3.192}$$

为广义 Lame 方程的极限情况. 在 $\pm\infty$ 处势指数衰减为零, 具有离散谱与连续谱. 离散谱本征函数在 $\pm\infty$ 处衰减为零, 是平方可积解, 可将它们表示为

$$\psi(z)=(\cosh z)^{-l}\chi(z). \tag{3.193}$$

令 $\zeta=\sinh^2 z$, $\chi(\zeta)$ 满足下列形式的超比方程

$$-\zeta(\zeta+1)\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\zeta^2}\chi+\left[(l-1)\zeta-\frac{1}{2}\right]\frac{\mathrm{d}\chi}{\mathrm{d}\zeta}-\frac{1}{4}(\xi+l^2)\chi=0, \tag{3.194}$$

其中,

$$\xi=-(l-n)^2,\quad n=0,1,\cdots,l-1. \tag{3.195}$$

连续谱可表示为

$$\xi=k^2,$$

$$\psi_k(z)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}P(\eta),\quad \eta=\tanh z,$$

其中, $P(\eta)$ 满足如下形式的雅可比方程:

$$(1-\eta^2)\frac{\mathrm{d}^2P}{\mathrm{d}\eta^2}+(2\mathrm{i}k-2\eta)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\eta}P+l(l+1)P=0 \tag{3.196}$$

其解为 l 阶雅可比多项式

$$P_l^{m,-m}(\eta),\quad m=-\mathrm{i}k$$

由 (3.195) 式可知有 $l-1$ 个束缚态解.

习 题 3

1. 设势能 $V(x)$ 在转折点附近变化缓慢, 可线性逼近, 这样将相应薛定谔方程的解：Aizy 函数, 与 WKB 波函数比较, 可以确定用 $n=\pm\frac{1}{3}$ 阶 Bessel 函数 $J_n(x)$ 与 $I_n(x)$ 光滑连接, 并请导出连接条件 (3.43a) 式和 (3.43b) 式.
2. 在无限高势垒的势阱 (见图 3.11), 请用 WKB 方法计算束缚态能级的量子化条件

$$\int_0^a \mathrm{d}xp=\left(n+\frac{3}{4}\right)\pi\hbar.$$

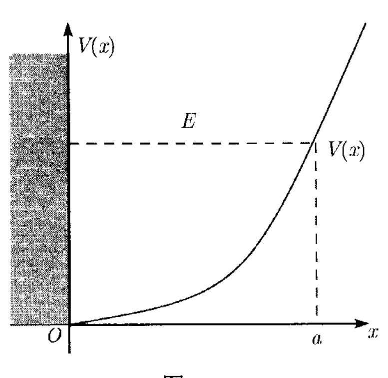


图 3.11

3. 请求出在双势阱 $V(x)=\dfrac{m\omega^2}{8a^2}(x^2-a^2)^2$ 中零能的非平庸解, 分析其特点并计算其作用量.

4. 请计算双势阱中的基态能级分裂问题.

5. 请求出满足涨落方程

$$\left[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2}+\omega^2\left(1-\frac{3}{2\cosh^2\dfrac{\omega\tau}{2}}\right)\right]\varphi_k=\lambda_k\varphi_k,$$

其边界条件为

$$\varphi_k\left(-\frac{T}{2}\right)=0=\varphi_k\left(\frac{T}{2}\right)$$

的零模解.

第 4 章 路径积分的微扰级数展开

4.1 微扰级数展开的基本理论, 一维 δ 函数势问题

量子理论中的微扰方法在路径积分中很容易实现. 路径积分的微扰展开多是基于费恩曼核或传播函数进行的, 费恩曼引入的费恩曼图技术为路径积分的微扰级数展开提供了清晰的物理解释, 在现代量子场论中得到广泛应用. 而且利用微扰级数的无穷求和有可能得到确定的结果, 这也正是路径积分的微扰展开与通常量子理论中常用近似方法的重要区别. 本节对此仅作初步介绍, 主要介绍在非相对论量子力学中的应用.

微扰级数展开 考虑如下一维动力学体系, 将势分解为两部分, 即

$$U(x) = V_0(x) + \alpha V(x)\ ,$$

其中, 势 $V_0(x)$ 为可精确求解部分, 而 α 为小参量, 这样可将有关微扰部分 $V(x)$ 的处理按耦合常数 α 的幂次展开. 体系拉氏量为

$$L = \frac{m}{2}\dot{x}^2 - V_0(x) - \alpha V(x) = L_0 - \alpha V(x) \tag{4.1}$$

其中, 假定精确可解部分 L_0 相关的费恩曼传播函数 $K_0(x_b,t_b;x_a,t_a)$ 已知. 注意到 α 是小参数, 则整个体系的费恩曼传播函数 (费恩曼核) 为

$$\begin{aligned} K(x_b,t_b;x_a,t_a) &= \int_{x_a}^{x_b} \mathrm{D}x(t) \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t L_0\right\} \exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\alpha\int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t V\right\} \\ &= K_0(x_b,t_b;x_a,t_a) + \sum_{n=1}^{\infty}\left(-\frac{\mathrm{i}\alpha}{\hbar}\right)^n K_n(x_b,t_b;x_a,t_a)\ , \end{aligned} \tag{4.2}$$

其中,

$$K_n(x_b,t_b;x_a,t_a) = \frac{1}{n!}\int_{x_a}^{x_b} \mathrm{D}x(t) \left(\int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t V\right)^n \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t L_0\right\}. \tag{4.3}$$

其中, $K_0(x_b,t_b;x_a,t_a)$ 代表未受扰动的费恩曼传播函数. 为简单起见, 本节着重分析相当于自由粒子体系的微扰展开, 即 $L_0 = \dfrac{1}{2}m\dot{x}^2$, 用 K_0 代表自由粒子的费恩曼

传播函数, 即

$$\begin{aligned}
K_0\left(x_b, t_b; x_a, t_a\right) &= \int_{x_a}^{x_b} \mathrm{D}x(t) \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t \frac{m}{2}\dot{x}^2(t)} \\
&= \lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{\mathrm{i}2\pi\hbar\epsilon}\right)^{\frac{N+1}{2}} \int \prod_{k=1}^{N} \mathrm{d}x_k \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\epsilon\sum\limits_{j=0}^{N}\frac{m}{2}\left(\frac{x_{j+1}-x_j}{\epsilon}\right)^2} \\
&= \left(\frac{m}{\mathrm{i}2\pi\hbar T}\right)^{\frac{1}{2}} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{m}{2}\frac{(x_b-x_a)^2}{T}},
\end{aligned} \tag{4.4}$$

其中, $x_j = x(t_j), x_0 = x_a, x_{N+1} = x_b, T = t_b - t_a$. 现在处理 (4.3) 式中的展开项. 首先,

$$\begin{aligned}
&K_1\left(x_b, t_b; x_a, t_a\right) \\
&= \int_{x_a}^{x_b} \mathrm{D}x(t) \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S_0[x(t)]_{t_a}^{t_b}} \int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t V(x,t) \\
&= \lim_{N\to\infty}(N(\epsilon))^{\frac{N+1}{2}} \int \prod_{i=1}^{N} \mathrm{d}x_i \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{m}{2\epsilon}\sum\limits_{j=0}^{N}(x_{j+1}-x_j)^2} \int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t_k V(x_k, t_k) \\
&= \lim_{N\to\infty} \int \mathrm{d}x_k \int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t_k (N(\epsilon))^{\frac{k}{2}} \int \mathrm{d}x_1 \cdots \mathrm{d}x_{k-1} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{m}{2\epsilon}\sum\limits_{j=0}^{k-1}(x_{j+1}-x_j)^2} \\
&\quad \times (N(\epsilon))^{\frac{N-k+1}{2}} \int \mathrm{d}x_{k+1} \cdots \mathrm{d}x_N \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{m}{2\epsilon}\sum\limits_{j=k}^{n}(x_{j+1}-x_j)^2} V(x_k, t_k) \\
&= \int \mathrm{d}x_k \int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t_k K_0\left(x_b, t_b; x_k, t_k\right) V(x_k, t_k) K_0\left(x_k, t_k; x_a, t_a\right).
\end{aligned} \tag{4.5}$$

按此做法可以类似地讨论高阶项, 但要注意算子的时序问题, 例如

$$\begin{aligned}
&\left(\int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t V(x(t), t)\right)^2 \\
&= \int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t \int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t' V(x,t) V(x',t') \\
&= \int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t \int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t' [V(x,t)V(x',t')\Theta(t-t') + V(x',t')V(x,t)\Theta(t'-t)] \\
&= 2\int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t \int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t' V(x,t)\Theta(t-t')V(x',t') \\
&= 2\int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t \int_{t_a}^{t} \mathrm{d}t' V(x,t)V(x',t'),
\end{aligned} \tag{4.6}$$

即运算中要始终保持 $t_b > t > t' > t_a$ 的明显时序. 于是

$$
\begin{aligned}
K_2(x_b,t_b;x_a,t_a) &= \frac{1}{2!}\int_{x_a}^{x_b}\mathrm{D}x(t)\left(\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}tV(x,t)\right)^2 \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}tL_0} \\
&= \int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\int_{t_a}^{t}\mathrm{d}t'\int_{x_a}^{x_b}\mathrm{D}x(t)V(x,t)V(x',t')\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}tL_0} \\
&= \lim_{N\to\infty}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t_j\int\mathrm{d}x_j\int_{t_a}^{t_j}\mathrm{d}t_k\int\mathrm{d}x_k(N(\epsilon))^{\frac{N-j+1}{2}}\int\mathrm{d}x_{j+1} \\
&\quad\cdots\mathrm{d}x_N\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{m}{2\epsilon}\sum\limits_{l=j+1}^{N}(x_{l+1}-x_l)}V(x_j,t_j) \\
&\quad\times(N(\epsilon))^{\frac{j-k}{2}}\int\mathrm{d}x_{k+1}\cdots\mathrm{d}x_{j-1}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{m}{2\epsilon}\sum\limits_{l=k+1}^{j-1}(x_{l+1}-x_l)} \\
&\quad\times V(x_k,t_k)(N(\epsilon))^{\frac{k}{2}}\int\mathrm{d}x_1\cdots\mathrm{d}x_{k-1}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{m}{2\epsilon}\sum\limits_{l=0}^{k-1}(x_{l+1}-x_l)} \\
&= \int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t_j\int\mathrm{d}x_j\int_{t_a}^{t_j}\mathrm{d}t_k\int\mathrm{d}x_kK_0(x_b,t_b;x_j,t_j)V(x_j,t_j) \\
&\quad\times K_0(x_j,t_j;x_k,t_k)V(x_k,t_k)K_0(x_k,t_k;x_a,t_a) \\
&\equiv \int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t_j\int_{t_a}^{t_j}\mathrm{d}t_k\int\mathrm{d}x_j\mathrm{d}x_kK_0(b,j)V(x_j)K_0(j,k)V(x_k)K_0(k,a).
\end{aligned}
\tag{4.7}
$$

类推到高次项, 有

$$
\begin{aligned}
&\left(\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}tV(x,t)\right)^n \\
&= n!\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t_nV(x(t_n))\int_{t_a}^{t_n}\mathrm{d}t_{n-1}V(x(t_{n-1}))\cdots\int_{t_a}^{t_2}\mathrm{d}t_1V(x(t_1)).
\end{aligned}
\tag{4.8}
$$

将经过上述处理的诸式代入 (4.3) 式, 但要注意到指数展开因子 $\frac{1}{n!}$ 与级数展开项的时序本身引起的因子 $n!$ 相消, 并且交换泛函积分与对时间积分顺序后, 得

$$
\begin{aligned}
K_n(x_b,t_b;x_a,t_a) &= \int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t_n\int_{t_a}^{t_n}\mathrm{d}t_{n-1}\cdots\int_{t_a}^{t_2}\mathrm{d}t_1\int_{x_a}^{x_b}\mathrm{D}x(t)V(x_n) \\
&\quad\times V(x_{n-1})\cdots V(x_1)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}tL_0} \\
&= \int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t_n\int_{t_a}^{t_n}\mathrm{d}t_{n-1}\cdots\int_{t_a}^{t_2}\mathrm{d}t_1\int\mathrm{d}x_n\mathrm{d}x_{n-1}\cdots\mathrm{d}x_1 \\
&\quad\times K_0(b,n)V(x_n)K_0(n,n-1)\cdots V(x_1)K_0(1,a),
\end{aligned}
\tag{4.9}
$$

其中,

$$
K_0(j,i) = K_0(x_j,t_j;x_i,t_i).
\tag{4.10}
$$

这样展开的每一项都有物理解释, 它们可用图 4.1 表示. K_0 代表未受扰动的传播子; K_1 代表粒子由 (x_a,t_a) 传播到 (x_1,t_1), 在 $t=t_1$ 处遇到扰动 $V(x_1)$, 再传播至 (x_b,t_b); K_2 则代表粒子由 (x_a,t_a) 到 (x_b,t_b) 的传播过程中, 先后在 x_1 和 x_2 处受到两次扰动 $V(x_1)$ 和 $V(x_2)$; 如此等等.

在图 4.1 中, 时间演化方向由底向上传播, 直线代表粒子的自由传播函数 K_0, 而线段的折点代表相互作用顶点 $-\dfrac{\mathrm{i}\alpha}{\hbar}V$, 且对每个顶点出现一对空间及时间的积分.

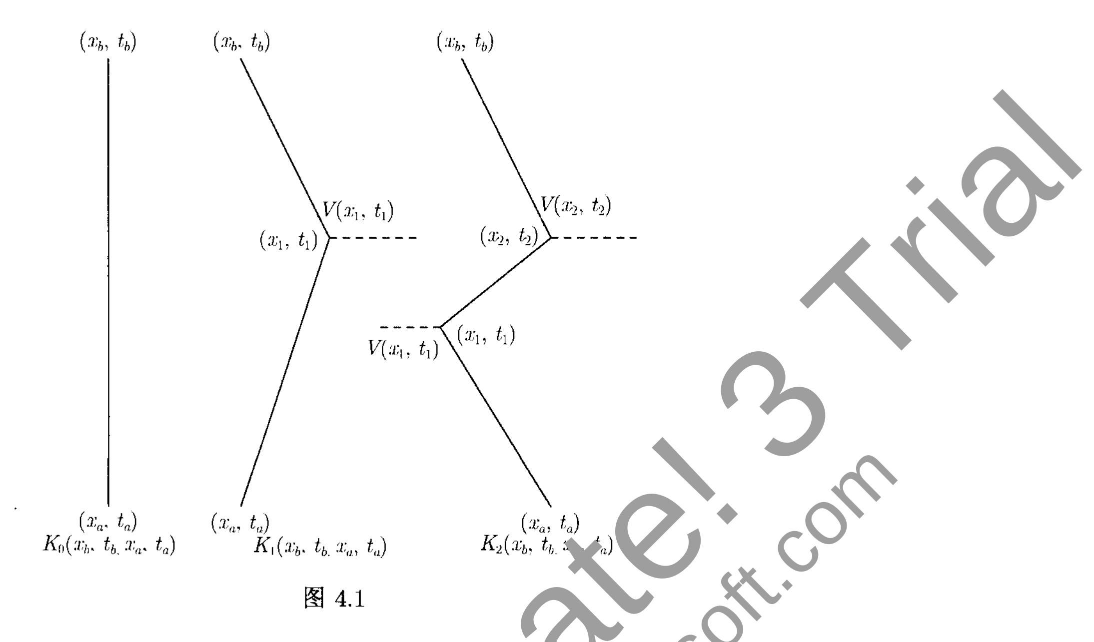


图 4.1

这样, 体系的整个费恩曼传播函数可表示为

$$K\left(x_b,t_b;x_a,t_a\right)=K_0\left(x_b,t_b;x_a,t_a\right)-\frac{\mathrm{i}\alpha}{\hbar}K_1\left(x_b,t_b;x_a,t_a\right)+\cdots. \tag{4.11}$$

此展开式可表示为含 $U=-\dfrac{\mathrm{i}\alpha}{\hbar}V$ 的形式求和, 即

$$\begin{aligned}K&=K_0+K_0UK_0+K_0UK_0UK_0+\cdots\\&=K_0+K_0U\left(K_0+K_0UK_0+\cdots\right)\\&=K_0+K_0UK,\end{aligned} \tag{4.12}$$

因此, 整个费恩曼传播函数 K 满足如下积分方程 (Bethe-Salpeter 方程):

$$\begin{aligned}K\left(x_b,t_b;x_a,t_a\right)=&K_0\left(x_b,t_b;x_a,t_a\right)-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int\mathrm{d}x\mathrm{d}tK_0\left(x_b,t_b;x,t\right)\\&\times\alpha V(x,t)K\left(x,t;x_a,t_a\right).\end{aligned} \tag{4.13}$$

该方程也可用图 4.2 表示.

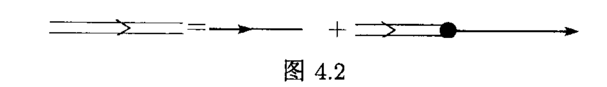


图 4.2

其中, 双线代表包括所有相互作用效果的整个传播函数 K, 单线代表自由传播函数 K_0, 而双线与单线间的连接点代表相互作用.

对于拉氏量不显含时间的保守体系, 传播函数 K 仅依赖时间差 $T = t_b - t_a$, 因而将格林函数 $K(x_b, x_a; T)\Theta(T)$ 作傅里叶变换, 可获得依赖能量的格林函数

$$\begin{aligned}\mathcal{G}(x_b, x_a; E) &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}T \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}ET} K(x_b, x_a, T)\Theta(T) \\ &= \int_0^{\infty} \mathrm{d}T \int_{x_a}^{x_b} \mathrm{D}x(t) \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^T \mathrm{d}t(L+E)} \\ &= \mathcal{G}_0(x_b, x_a; E) + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{\mathrm{i}\alpha}{\hbar}\right)^n \mathcal{G}_n(x_b, x_a; E),\end{aligned} \tag{4.14}$$

其中,

$$\mathcal{G}_n(x_b, x_a; E) = \int \prod_{j=0}^{n} \mathcal{G}_0(x_{j+1}, x_j; E) \prod_{j=1}^{n} V(x_j) \mathrm{d}x_j. \tag{4.15}$$

注意在 (4.9) 式 K_n 的表达式中, 需要对中间坐标和时间都作积分, 而经过傅里叶变换后, 在 (4.15) 式中仅需要对中间坐标积分.

一维 δ 函数势　到此, 已对路径积分的微扰级数展开作了简要介绍, 下面以一维 δ 函数势为例再进行简单讨论. 此时, 体系的拉氏量为

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \alpha\delta(x). \tag{4.16}$$

自由粒子传播函数 K_0 为

$$K_0(x_b, t_b; x_a, t_a) = \left(\frac{m}{2\pi \mathrm{i}\hbar(t_b - t_a)}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{m}{2}\frac{(x_b - x_a)^2}{t_b - t_a}\right\},$$

相应地一维自由粒子的格林函数为

$$\mathcal{G}_0(x_b, x_a; E) = \left(\frac{m}{2E}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\{\mathrm{i}k|x_b - x_a|\}, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad \mathrm{Im}\, k > 0. \tag{4.17}$$

容易验证它满足自由粒子的点源非齐次运动方程

$$\left(E + \frac{m}{2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\right)\mathcal{G}_0(x, x_a; E) = \delta(x - x_a), \tag{4.18}$$

其傅里叶变换恰为自由粒子传播函数 $K(x_b,x_a;T)\Theta(T)$. 将 (4.17) 式代入 (4.15) 式并完成对坐标的积分后, 得

$$\begin{aligned}\mathcal{G}_n(x_b,x_a;E) &= \mathcal{G}_0(x_b,0;E)\mathcal{G}_0(0,x_a;E)\left[\mathcal{G}_0(0,0;E)\right]^{n-1} \\ &= \left(\frac{m}{2E}\right)^{\frac{n+1}{2}}\exp\{\mathrm{i}k(|x_b|+|x_a|)\},\end{aligned} \tag{4.19}$$

再代入 (4.14) 式得

$$\begin{aligned}\mathcal{G}(x_b,x_a;E) &= \mathcal{G}_0(x_b,x_a;E)+\sum_{n=1}^{\infty}\left(-\frac{\mathrm{i}\alpha}{\hbar}\right)^n\mathcal{G}_n(x_b,x_a;E) \\ &= \left(\frac{m}{2E}\right)^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|x_b-x_a|}+\left(\frac{m}{2E}\right)^{\frac{1}{2}}\sum_{n=1}^{\infty}\left(-\frac{\mathrm{i}\alpha}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{2E}}\right)^n\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(|x_b|+|x_a|)} \\ &= \left(\frac{m}{2E}\right)^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|x_b-x_a|}+\frac{\alpha}{\mathrm{i}\hbar}\frac{m}{2E}\left(1-\sqrt{\frac{m}{2E}}\frac{\alpha}{\mathrm{i}\hbar}\right)^{-1}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(|x_b|+|x_a|)}.\end{aligned} \tag{4.20}$$

当 α 取负值, 则上述格林函数有一极点, 位于

$$E=-\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}, \tag{4.21}$$

正是负 δ 函数势体系的唯一束缚态, 这与通常量子力学计算相同, 且由 (4.20) 式易看出此束缚态波函数为

$$\psi(x)=\left(\frac{m|\alpha|}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left\{\frac{m\alpha}{\hbar}|x|\right\},\quad \alpha<0. \tag{4.22}$$

4.2 非谐和振子的微扰展开, 基态能级的微扰展开

谐振子势为背景的微扰展开 用路径积分作微扰展开, 并可利用费恩曼图帮助分析, 这些在量子场论中已得到广泛应用. 4.1 节着重分析了以自由粒子为背景的微扰展开, 本节以非谐和振子为例, 介绍以谐振子势为背景的微扰展开, 重点分析其基态能级的微扰展开, 通过此例进一步掌握路径积分微扰展开特点.

谐振子能谱恒正, 为使计算各步明显收敛, 采用欧几里得技术, 即将时间参量作解析延拓

$$\mathrm{i}t\to\tau,$$

使路径积分具有正定积分测度.

设体系拉氏量

$$L=\frac{1}{2}m\dot{q}^2-\frac{1}{2}m\omega^2q^2-\frac{\lambda}{4!}q^4, \tag{4.23}$$

其中 λ 为小参量. 计算体系在欧氏空间的费恩曼传播函数

$$
\begin{aligned}
K_E(q_b,\tau_b;q_a,\tau_a) &= \langle q_b|\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}\hat{H}(\tau_b-\tau_a)}|q_a\rangle \\
&= \mathcal{N}\int_{q_a}^{q_b}\mathrm{D}q(\tau)\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}\int_0^T \mathrm{d}\tau\left(\frac{1}{2}m\dot{q}(\tau)^2+\frac{1}{2}m\omega^2q^2+\frac{\lambda}{4!}q^4\right)}.
\end{aligned}
\tag{4.24}
$$

(4.24) 式中 $T=\tau_b-\tau_a$, 由于有 q^4 项, 体系不再能精确求解, 为此需要对 λ 小参量作微扰展开:

$$
\begin{aligned}
K_E(q_b,\tau_b;q_a,\tau_a) &= \mathcal{N}\int_{q_a}^{q_b}\mathrm{D}q(\tau)\left(1-\frac{\lambda}{4!}\frac{1}{\hbar}\int_0^T\mathrm{d}\tau q^4(\tau)\right) \\
&\quad\times\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}\int_0^T\mathrm{d}\tau\left(\frac{1}{2}m\dot{q}(\tau)^2+\frac{1}{2}m\omega^2q^2\right)}+O(\lambda^2).
\end{aligned}
\tag{4.25}
$$

为分析体系基态结构, 需计算配分函数的虚时路径积分:

$$
\begin{aligned}
Z_\lambda(T) &= \mathrm{tr}(\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}\hat{H}T}) = \int\mathrm{d}q_b\int\mathrm{d}q_a\delta(q_a-q_b)K_E(q_b,\tau_b;q_a,\tau_a) \\
&= \int_{q(0)=q(T)}\mathrm{D}q(\tau)\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}\int_0^T\mathrm{d}\tau(\frac{1}{2}m\dot{q}(\tau)^2+\frac{1}{2}m\omega^2q^2+\frac{\lambda}{4!}q^4)} \\
&= \int_{q(0)=q(T)}\mathrm{D}q(\tau)\left(1-\frac{\lambda}{4!}\frac{1}{\hbar}\int_0^T\mathrm{d}\tau q^4(\tau)+O(\lambda^2)\right) \\
&\quad\times\exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\int_0^T\mathrm{d}\tau\left(\frac{1}{2}m\dot{q}(\tau)^2+\frac{1}{2}m\omega^2q^2\right)\right\} \\
&= Z_0(T)+<-\frac{\lambda}{4!}\frac{1}{\hbar}\int_0^T\mathrm{d}\tau q^4(\tau)>+O(\lambda^2),
\end{aligned}
\tag{4.26}
$$

式中, $<\ >$ 代表以谐振子为背景权重的统计平均值, 其定义为

$$
<f(q(\tau))>=\int_{q(0)=q(T)}\mathrm{D}q(\tau)f(q(\tau))\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}S_H[q(\tau)]},
\tag{4.27}
$$

其中

$$
S_H[q(\tau)]=\int_0^T\mathrm{d}\tau\left(\frac{1}{2}m\dot{q}(\tau)^2+\frac{1}{2}m\omega^2q^2\right).
$$

为计算各阶微扰项, 可借助外源泛函分析技术, 即研究在外力场中谐振子的配分函数:

$$
\begin{aligned}
Z\left[J(\tau)\right] &= \int_{q(0)=q(T)}\mathrm{D}q(\tau)\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}\int_0^T\mathrm{d}\tau\left(\frac{1}{2}m\dot{q}^2+\frac{1}{2}m\omega^2q^2-J(\tau)q(\tau)\right)} \\
&\equiv \int\mathrm{D}q(\tau)\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}S_H^J[q(\tau)]},
\end{aligned}
\tag{4.28}
$$

称为格林函数生成泛函, 将它对外源 $J(\tau)$ 作一次变分

$$
\begin{aligned}
\frac{\delta Z\left[J(\tau)\right]}{\delta J(\tau_1)} &= \int \mathrm{D}q(\tau)\frac{1}{\hbar}\int_0^T \mathrm{d}\tau\delta(\tau_1-\tau)q(\tau)\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}S_H^J[q(\tau)]} \\
&= \frac{1}{\hbar}\int \mathrm{D}q(\tau)q(\tau_1)\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}S_H^J[q(\tau)]},
\end{aligned}
\tag{4.29}
$$

二次变分

$$
\frac{\delta^2 Z\left[J(\tau)\right]}{\delta J(\tau_1)\delta J(\tau_2)} = \frac{1}{\hbar^2}\int \mathrm{D}q(\tau)q(\tau_1)q(\tau_2)\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}S_H^J[q(\tau)]}. \tag{4.30}
$$

推广到坐标任意函数 $f(q)$:

$$
f\left[\hbar\frac{\delta}{\delta J}\right]Z[J] = \int \mathrm{D}q(\tau)f(q)\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}S_H^J[q(\tau)]}. \tag{4.31}
$$

于是 (4.26) 式和 (4.27) 式中微扰项的计算可表示为

$$
< f(q(\tau)) >= f\left[\hbar\frac{\delta}{\delta J}\right]Z[J]|_{J=0}. \tag{4.32}
$$

生成泛函 $Z[J]$ 的计算 现在回到本节问题的关键, 即 (4.28) 式中格林函数生成泛函 $Z[J]$ 的计算. 按照 2.3 节计算在外场中谐振子路径积分的做法, 采用稳相近似将 $Z[J]$ 在经典轨道周围展开, 即

$$
\begin{aligned}
Z\left[J(\tau)\right] &= \int_{q(0)=q(T)} \mathrm{D}q(\tau)\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}S_H^J[q(\tau)]} \\
&= F(T)\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}S_H^J[q_c(\tau)]},
\end{aligned}
\tag{4.33}
$$

其中, 量子涨落部分是

$$
F(T) = Z_H(T) = \frac{1}{2\sinh\dfrac{\omega T}{2}} = \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\omega T}{2}}}{1-\mathrm{e}^{-T\omega}}.
$$

它与无外源谐振子相同. 这里 (4.33) 式中的

$$
S_H^J[q_c(\tau)] = \int_0^T \mathrm{d}\tau\left(\frac{1}{2}m\dot{q}_{cl}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 q_{cl}^2 - J(\tau)q_{cl}(\tau)\right), \tag{4.34}
$$

其中, $q_{cl}(\tau)$ 满足下面欧拉–拉格朗日方程及相应边界条件

$$
m\ddot{q} - m\omega^2 q + J(\tau) = 0, \quad q(0) = q(T) = 0. \tag{4.35}
$$

为找其解, 可引入谐振子格林函数 $G(\tau)$, 它满足

$$
m\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2} - \omega^2\right)G(\tau) = -\delta(\tau), \quad G(0) = G(T), \dot{G}(0) = \dot{G}(T) \tag{4.36}
$$

而

$$q_{cl}(\tau) = \int_0^T \mathrm{d}\tau' G(\tau-\tau')J(\tau'). \tag{4.37}$$

将 (4.37) 式代入 (4.34) 式, 有

$$\begin{aligned} S_{cl}^J &= \int \mathrm{d}\tau q_{cl}\left(-\frac{1}{2}m\ddot{q}_{cl} + \frac{1}{2}m\omega^2 q_{cl} - J(\tau)\right) \\ &= -\frac{1}{2}\int \mathrm{d}\tau J(\tau)q_{cl}(\tau) \\ &= -\frac{1}{2}\int\int \mathrm{d}\tau\mathrm{d}\tau' J(\tau)G(\tau,\tau')J(\tau'). \end{aligned} \tag{4.38}$$

再代入 (4.33) 式, 有

$$Z[J] = F(T)\exp\left\{\frac{1}{2\hbar}\int \mathrm{d}\tau\mathrm{d}\tau' J(\tau)G(\tau,\tau')J(\tau')\right\}. \tag{4.39}$$

非谐和振子的基态能量　下面来分析 (4.26) 式, 计算对非谐和振子基态能量的一阶修正. 为了计算方便, 对称地分析初末态, 即取时间间隔为 $\left(-\frac{T}{2},\frac{T}{2}\right)$, 然后再令 $T\to\infty$, 此时格林函数满足

$$m\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2} - \omega^2\right)G(\tau,\tau') = -\delta(\tau-\tau').$$

对上式两边同时作傅里叶变换, 得

$$G(\tau,\tau') = \frac{1}{m}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}k}{2\pi}\frac{1}{k^2+\omega^2}\exp\{\mathrm{i}k(\tau-\tau')\}. \tag{4.40}$$

将以上结果代入 (4.26) 式则有

$$Z_\lambda(T) = F(T) - \frac{\lambda}{4!}\frac{1}{\hbar}\int_0^T \mathrm{d}\tau\left[\hbar\frac{\delta}{\delta J}\right]^4 Z[J]|_{J=0} + O(\lambda^2). \tag{4.41}$$

上式第二项中, 在对 $Z[J]$ 取四阶变分后, 令 $J=0$, 会发现 $Z[J]$ 中仅仅对于按 J 展开的四阶项有贡献, 即

$$\begin{aligned} Z[J] &= F(T)\exp\left\{\frac{1}{2\hbar}\int\int \mathrm{d}\tau\mathrm{d}\tau' J(\tau)G(\tau,\tau')J(\tau')\right\} \\ &\equiv F(T)\exp\left\{\frac{1}{2\hbar}[J_1G_{12}J_2]\right\} \\ &= F\left(1 + \frac{1}{2\hbar}[J_1G_{12}J_2] + \frac{1}{8\hbar^2}[J_1G_{12}J_2][J_3G_{34}J_4] + \cdots\right), \end{aligned}$$

其中, 仅第三项对 $Z_\lambda(T)$ 的计算有贡献. 这样代回 (4.41) 式得

$$Z_\lambda(T) = F(T) - \frac{\lambda}{4!}\frac{1}{8\hbar^3}\int \mathrm{d}\tau \left[\hbar\frac{\delta}{\delta J}\right]^4 [J_1 G_{12} J_2][J_3 G_{34} J_4]|_{J=0} + O(\lambda^2). \tag{4.42}$$

因为有

$$\begin{aligned}\left(\frac{\delta}{\delta J}\right)^2 [J_1 G_{12} J_2] &= \left(\frac{\delta}{\delta J_\tau}\right)^2 \iint \mathrm{d}\tau_1 \mathrm{d}\tau_2 J(\tau_1) G(\tau_1,\tau_2) J(\tau_2) \\ &= \frac{\delta}{\delta J_\tau}\left[\iint \mathrm{d}\tau_1 \mathrm{d}\tau_2 (\delta(\tau-\tau_1) G(\tau_1,\tau_2) J(\tau_2) + J(\tau_1) G(\tau_1,\tau_2)\delta(\tau-\tau_2)\right] \\ &= \frac{\delta}{\delta J_\tau}\left(\int \mathrm{d}\tau_2 G(\tau,\tau_2) J(\tau_2) + \int \mathrm{d}\tau_1 J(\tau_1) G(\tau_1,\tau)\right) \\ &= 2G(\tau,\tau),\end{aligned}$$

类似可推出

$$\left(\frac{\delta}{\delta J}\right)^4 [J_1 G_{12} J_2][J_3 G_{34} J_4] = 4! G(\tau,\tau)^2.$$

因而由 (4.40) 式可算出

$$G(\tau,\tau) = \frac{1}{m}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}k}{2\pi}\frac{1}{k^2+\omega^2} = -\frac{1}{2m\omega}, \tag{4.43}$$

故得

$$Z_\lambda(T) = F\left(1 - \frac{\hbar T\lambda}{32m^2\omega^2} + O(\lambda^2)\right). \tag{4.44}$$

而基态能量

$$\begin{aligned}E_0 &= \lim_{T\to\infty}\frac{-1}{T}\ln Z_\lambda(T) \\ &= \lim_{T\to\infty}\left(\frac{-\ln F}{T} + \frac{\hbar\lambda}{32m^2\omega^2} + O(\lambda^2)\right)\end{aligned}$$

即

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega + \frac{\hbar^2\lambda}{32m^2\omega^2} + O(\lambda^2). \tag{4.45}$$

另外, 通常量子力学中对基态能量的一阶修正为

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}q\, \Phi_0^*(q)\left(\frac{\lambda}{4!}q^4\right)\Phi_0(q) = \frac{\hbar^2\lambda}{32m^2\omega^2}, \tag{4.46}$$

二者一致.

4.3　多点格林函数与生成泛函, Wick 定理

多点格林函数　格林函数在量子场论中具有广泛的应用, 并已形成系统成套的方法. 这套方法在非相对论量子力学、凝聚态物理等得到广泛应用, 并获得丰硕成果. 这里作简单介绍.

在海森伯绘景中, 场算子

$$\hat{x}(t)=\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}t}\hat{x}(0)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}t}, \tag{4.47}$$

其本征矢为 $|x,t\rangle_H$, 满足

$$\hat{x}(t)\,|x,t\rangle_H=x\,|x,t\rangle_H\,. \tag{4.48}$$

为简单起见, 设哈密顿量 $\hat{H}$ 不显含时间 t, 则

$$|x,t\rangle_H=\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}t}\,|x\rangle_S\,.$$

为简化符号, 在本节以后的讨论中省去 $|x,t\rangle_H$ 的下标 H. 在固定时刻 t, $\{|x,t\rangle\}$ 形成正交归一完备集:

$$\begin{aligned}&\langle x,t|x',t\rangle=\delta(x-x'),\\&\int\mathrm{d}x|x,t\rangle\langle x,t|=I.\end{aligned} \tag{4.49}$$

费恩曼传播函数:

$$\begin{aligned}K(x_b,t_b;x_a,t_a)&=\langle x_b,t_b|x_a,t_a\rangle={}_S\langle x_b|\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}H(t_b-t_a)}|x_a\rangle_S\\&=\mathcal{N}\int_{x_a}^{x_b}\mathrm{D}x(t)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x(t)]_{t_a}^{t_b}}.\end{aligned} \tag{4.50}$$

下面来讨论格林函数. 定义单点格林函数 (令 $t_a<t_j<t_b$):

$$\begin{aligned}&\langle x_b,t_b|\,\hat{x}(t_j)\,|x_a,t_a\rangle\\=&\int\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\,\langle x_b,t_b|\,x_2,t_j\rangle\,\langle x_2,t_j|\,\hat{x}(t_j)\,|x_1,t_j\rangle\,\langle x_1,t_j|\,x_a,t_a\rangle\\=&\int\mathrm{d}x_1x_1\,\langle x_b,t_b|\,x_1,t_j\rangle\,\langle x_1,t_j|\,x_a,t_a\rangle.\end{aligned} \tag{4.51}$$

选取时间区间使 t_j 为第 j 时间点, 将其中 $\langle x_b,t_b|\,x_1,t_j\rangle$ 与 $\langle x_1,t_j|x_a,t_a\rangle$ 都用路径

积分表示后, 得

$$
\begin{aligned}
&\langle x_b, t_b|\,\hat{x}(t_j)\,|x_a, t_a\rangle \\
\equiv&\int_{x_a}^{x_b} \mathrm{D}x(t)\frac{\mathrm{D}p(t)}{2\pi\hbar}x(t_j)\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t(p\dot{x}-H(p,x))\right\} \qquad (4.52)\\
=&\mathcal{N}\int_{x_a}^{x_b}\mathrm{D}x(t)x(t_j)\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\left(\frac{m}{2}\dot{x}^2-V(x)\right)\right\}\\
=&\mathcal{N}\int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b}\mathrm{D}x(t)x(t_j)\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x(t)]\right\}. \qquad (4.53)
\end{aligned}
$$

两点格林函数定义为 $\langle x_b, t_b|\,\mathcal{T}[\hat{x}(t_1)\hat{x}(t_2)]\,|x_a, t_a\rangle$, 这里 $\mathcal{T}$ 代表时序算子. 首先设 $t_1 > t_2$, 则

$$
\begin{aligned}
&\langle x_b, t_b|\,\mathcal{T}[\hat{x}(t_1)\hat{x}(t_2)]\,|x_a, t_a\rangle = \langle x_b, t_b|\,\hat{x}(t_1)\hat{x}(t_2)\,|x_a, t_a\rangle \qquad (4.54)\\
=&\int \mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\,\langle x_b, t_b|\,x_1, t_1\rangle\,\langle x_1, t_1|\,\hat{x}(t_1)\hat{x}(t_2)\,|x_2, t_2\rangle\,\langle x_2, t_2|\,x_a, t_a\rangle\\
=&\int \mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2 x_1 x_2\,\langle x_b, t_b|\,x_1, t_1\rangle\,\langle x_1, t_1|\,x_2, t_2\rangle\,\langle x_2, t_2|\,x_a, t_a\rangle\\
=&\mathcal{N}\int \mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2 x_1 x_2\int_{x(t_1)=x_1}^{x(t_b)=x_b}\mathrm{D}x(t)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x(t)]}\\
&\times\int_{x(t_2)=x_2}^{x(t_1)=x_1}\mathrm{D}x(t)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x(t)]}\int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_2)=x_2}\mathrm{D}x(t)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x(t)]}. \qquad (4.55)
\end{aligned}
$$

此表达式由三个路径积分表示, 第一个由初始位置 x_a 到达任意位置 x_2, 然后再由它到达第二个任意位置 x_1, 最后到达终点 x_b. 当对两个中间位置积分后, 实际上相当于对所有的路径积分. 而在两个中间位置分别作用 x_2 与 x_1, 所以

$$
\begin{aligned}
&\langle x_b, t_b|\,\mathcal{T}[\hat{x}(t_1)\hat{x}(t_2)]\,|x_a, t_a\rangle\\
=&\mathcal{N}\int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b}\mathrm{D}x(t)x(t_1)x(t_2)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x(t)]}\quad (t_1>t_2) \qquad (4.56)
\end{aligned}
$$

类似地, 也可计算 $t_2 > t_1$ 时的情况, 最后表达式相同. 因此, 对所有时间都有 $t_a \leqslant t_1, t_2 \leqslant t_b$

$$
\langle x_b, t_b|\,\mathcal{T}[\hat{x}(t_1)\hat{x}(t_2)]\,|x_a, t_a\rangle = \mathcal{N}\int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b}\mathrm{D}x(t)x(t_1)x(t_2)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x(t)]}, \qquad (4.57)
$$

或者说路径积分可自动体现时序.

以上分析可推广到多点格林函数的情况:

$$
\langle x_b, t_b|\,\mathcal{T}[\hat{x}(t_1)\cdots\hat{x}(t_k)]\,|x_a, t_a\rangle = \mathcal{N}\int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b}\mathrm{D}x(t)x(t_1)\cdots x(t_k)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x(t)]}. \qquad (4.58)
$$

格林函数可用于各种物理过程, 特别是对于散射、衰变等过程. 通常假定相互作用绝热渐近引入, 然后再渐近撤销, 且不会破坏能量动量守恒.

例如, 对于保守体系, 将始末态都按哈密顿量 $\hat{H}$ 的本征态展开, 即

$$\begin{aligned}\langle x_b,t_b|x_a,t_a\rangle &= \langle x_b|\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}(t_b-t_a)}|x_a\rangle \\ &= \sum_n \langle x_b|\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}(t_b-t_a)}|n\rangle\langle n|x_a\rangle \\ &= \sum_n \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_n(t_b-t_a)}\psi_n(x_b)\psi_n^*(x_a),\end{aligned} \tag{4.59}$$

假定当 $t_a\to-\infty$ 时体系处于基态, 到 $t_b\to\infty$ 体系仍处于基态, 但位相发生变化.

令 $|\varOmega\rangle$ 表示体系基态, 取 $t_a=-T$, $t_b=T$, $T\to\infty$, 且设

$$T=|T|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\epsilon}=|T|(1-\mathrm{i}\epsilon),\quad (\epsilon>0), \tag{4.60}$$

则

$$\langle x_b,T|x_a,-T\rangle\sim\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}2E_0T}\mathrm{e}^{-\frac{2}{\hbar}E_0T\epsilon}\big[|\varOmega\rangle\langle\varOmega|+O(\mathrm{e}^{-\frac{2}{\hbar}(E_1-E_0)T\epsilon})\big], \tag{4.61}$$

因此当采用准经典近似 $\left(\dfrac{T}{\hbar}\to\infty\right)$, 演化算子成为到基态上的投影算子, 使得

$$\langle x_b,T|x_a,-T\rangle \ \sim\ \langle\varOmega,T|\varOmega,-T\rangle. \tag{4.62}$$

其中比例因子包括 $\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}2E_0T}\mathrm{e}^{-\frac{2}{\hbar}E_0T\epsilon}$ 和基态波函数等. 而且真空 $|\varOmega,\pm T\rangle$ 还可能差一相因子. 为确定上式中的比例关系, 作如下处理. 因为

$$\begin{aligned}&\langle\varOmega,T|\varOmega,-T\rangle \\ =&\int\mathrm{d}x_b\mathrm{d}x_a\langle\varOmega,T|x_b,T\rangle\langle x_b,T|x_a,-T\rangle\langle x_a,-T|\varOmega,-T\rangle \\ =&\int\mathrm{d}x_b\mathrm{d}x_a\psi_f^*(x_b)\langle x_b,T|x_a,-T\rangle\psi_i(x_a),\end{aligned} \tag{4.63}$$

注意到 $T=|T|\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\epsilon}(\epsilon>0)$, 则

$$\langle\varOmega,T|\,\varOmega,-T\rangle\sim\langle x_b,T|\,x_a,-T\rangle=N\int_{x(-T)=x_a}^{x(T)=x_b}\mathrm{D}x\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S}.$$

推广到多点情况, 有

$$\langle\varOmega,T|\,T[\hat{x}(t_1)\cdots\hat{x}(t_n)]\,|\varOmega,-T\rangle\sim N\int_{x(-T)=x_a}^{x(T)=x_b}\mathrm{D}x(t)x(t_1)\cdots x(t_n)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S}.$$

为清除不确定因子, 将格林函数重新定义为

$$
\begin{aligned}
G_n(t_1,t_2,\cdots,t_n) &= \langle \Omega |\, \mathcal{T}[\hat{x}(t_1)\cdots\hat{x}(t_n)]\, |\Omega\rangle \\
&= \frac{\langle \Omega,T|\, \mathcal{T}[\hat{x}(t_1)\cdots\hat{x}(t_n)]\, |\Omega,-T\rangle}{\langle \Omega,T|\, \Omega,-T\rangle} \\
&= \frac{\displaystyle\int \mathrm{D}x x(t_1)\cdots x(t_n)\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S\right\}}{\displaystyle\int \mathrm{D}x \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S\right\}}.
\end{aligned}
\tag{4.64}
$$

分子分母中基态波函数及相应指数因子等均抵消, 这样, 比例符号“$\sim$”变成了等号. 上式分母中的路径积分已很熟悉, 且容易计算, 关键是上式中的分子部分的计算.

格林函数生成泛函 为此, 采用上节微扰计算办法, 即引入加外源项的格林函数生成泛函

$$
\begin{aligned}
Z[J] &= \frac{\displaystyle\int \mathrm{D}x \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int \mathrm{d}tJ(t)x(t)\right\}}{\displaystyle\int \mathrm{D}x \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S\right\}} = \frac{\langle \Omega,T|\, \Omega,-T\rangle^J}{\langle \Omega,T|\, \Omega,-T\rangle} \\
&= \langle \Omega|\mathcal{T}\left[\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int \mathrm{d}tJ(t)\hat{x}(t)\right\}\right]|\Omega\rangle,
\end{aligned}
\tag{4.65}
$$

于是

$$
\begin{aligned}
\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\delta}{\delta J(t_1)}Z[J]|_{J=0} &= \left(\frac{\displaystyle\int \mathrm{D}x x(t_1)\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int \mathrm{d}tJ(t)x(t)\right\}}{\displaystyle\int \mathrm{D}x \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S\right\}}\right)\Bigg|_{J=0} \\
&= \frac{\displaystyle\int \mathrm{D}x x(t_1)\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S\right\}}{\displaystyle\int \mathrm{D}x \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S\right\}} = \langle \Omega|\, \hat{x}(t_1)\, |\Omega\rangle,
\end{aligned}
\tag{4.66}
$$

进一步推广, 可得

$$
\begin{aligned}
\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\delta}{\delta J(t_1)}\cdots\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\delta}{\delta J(t_k)}\right)Z[J]|_{J=0} &= \frac{\displaystyle\int \mathrm{D}x x(t_1)x(t_2)\cdots x(t_k)\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S\right\}}{\displaystyle\int \mathrm{D}x \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S\right\}} \\
&= \langle \Omega|\, \mathcal{T}[\hat{x}(t_1)\cdots\hat{x}(t_k)]\, |\Omega\rangle.
\end{aligned}
\tag{4.67}
$$

$Z[J]$ 称为格林函数生成泛函.

下面分别以自由粒子和谐振子为例分析在其背景下的微扰计算, 以便对格林函数及其生成泛函有更深刻的认识. 同时还将引入关联函数的概念. 事实上, 采用的分析过程或方法相当于在 2.2 节中关于外力场中自由粒子及谐振子的处理过程.

连通格林函数与关联函数　对于在外力场中自由粒子, 体系的拉氏量为

$$L=\frac{m}{2}\dot{x}^2+J(t)x.$$

体系费恩曼传播函数为

$$K^J(x_b,t_b;x_a,t_a)=\lim_{N\to\infty}\int\prod_1^{N-1}\mathrm{d}x_i\prod_0^{N-1}\frac{\mathrm{d}p_i}{2\pi\hbar}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{j=0}^{N-1}\left[p_i(x_{j+1}-x_j)-\epsilon\frac{p_j^2}{2m}+\epsilon J(t_j)x_j\right]\right\}.\tag{4.68}$$

对于自由粒子, 由于指数上坐标项是线性的, 因此可先对坐标积分, 并得到 $N-1$ 个 δ 函数, 即

$$\begin{aligned}K^J(x_b,t_b;x_a,t_a)=&\lim_{N\to\infty}\frac{1}{2\pi\hbar}\int\mathrm{d}p_0\cdots\mathrm{d}p_{N-1}\delta(\epsilon J(t_1)+p_0-p_1)\times\cdots\\&\times\delta(\epsilon J(t_{N-1})+p_{N-2}-p_{N-1})\\&\times\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(p_{N-1}x_b-p_0x_a+\epsilon J(t_0)x_a)-\frac{\mathrm{i}\epsilon}{2m\hbar}\sum_{j=0}^{N-1}p_j^2\right\}\end{aligned}\tag{4.69}$$

利用此 $(N-1)$ 个 δ 函数, 再完成对 $(N-1)$ 个 p 的积分后, 得

$$\begin{aligned}&K^J(x_b,t_b;x_a,t_a)\\=&\lim_{N\to\infty}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}x_a\sum_{j=0}^{N-1}\epsilon J(t_j)\right\}\int\frac{\mathrm{d}p_{N-1}}{2\pi\hbar}\\&\times\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[p_{N-1}(x_b-x_a)-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{j=0}^{N-1}\frac{\epsilon}{2m}\left(p_{N-1}-\sum_{k=j+1}^{N-1}\epsilon J(t_k)\right)^2\right]\right\}\\=&\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}x_a\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}tJ(t)\right\}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}p}{2\pi\hbar}\cdot\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p(x_b-x_a)-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\right.\\&\left.\times\left[\frac{p^2}{2m}-\frac{p}{m}\int_t^{t_b}\mathrm{d}tJ(t)+\frac{1}{2m}\left(\int_t^{t_b}\mathrm{d}\tau J(\tau)\right)^2\right]\right\},\end{aligned}\tag{4.70}$$

记

$$I(t)=\int_t^{t_b}\mathrm{d}tJ(t)=\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}\tau\,\Theta(\tau-t)J(\tau)$$

则有

$$
\begin{aligned}
&K^J(x_b,t_b;x_a,t_a)\\
=&\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[x_aI(t_a)-\frac{1}{2m}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}tI^2(t)\right]\right\}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}p}{2\pi\hbar}\\
&\times\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p^2}{2m}(t_b-t_a)+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p\left[(x_b-x_a)+\frac{1}{m}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}tI(t)\right]\right\}\\
=&K_0\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[\frac{x_b-x_a}{t_b-t_a}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}tI(t)+x_aI(t_a)\right.\right.\\
&\left.\left.+\frac{1}{2m(t_b-t_a)}\left(\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}tI(t)\right)^2-\frac{1}{2m}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}tI^2(t)\right]\right\},
\end{aligned}
\tag{4.71}
$$

其中,

$$
K_0=\left(\frac{1}{2\mathrm{i}\pi\hbar(t_b-t_a)}\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{m}{2}\frac{(x_b-x_a)^2}{t_b-t_a}\right\}
\tag{4.72}
$$

是自由粒子费恩曼传播函数.

利用在外场中费恩曼传播函数, 可如 (4.65) 式组成格林函数生成泛函

$$
\begin{aligned}
Z[J]=&\frac{K^J(x_b,t_b;x_a,t_a)}{K_0}=\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{x_b-x_a}{t_b-t_a}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}tI(t)+x_aI(t_a)\right.\\
&\left.+\frac{1}{2m(t_b-t_a)}\left(\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}tI(t)\right)^2-\frac{1}{2m}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}tI^2(t)\right\}.
\end{aligned}
\tag{4.73}
$$

利用变分规则

$$
\frac{\delta I(t)}{\delta J(t_1)}=\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}\tau\Theta(\tau-t)\delta(\tau-t_1)=\Theta(t_1-t)
\tag{4.74}
$$

得到形如 (4.66) 式的单粒子格林函数

$$
\begin{aligned}
\langle\Omega|\hat{x}(t_1)|\Omega\rangle=&-\mathrm{i}\hbar\frac{\delta}{\delta J(t_1)}Z[J]|_{J=0}\\
=&\frac{x_b-x_a}{t_b-t_a}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\Theta(t_1-t)+x_a\Theta(t_1-t_a)\\
=&x_a+\frac{x_b-x_a}{t_b-t_a}(t_1-t_a)=x_c(t_1)
\end{aligned}
\tag{4.75}
$$

和两点格林函数

$$
\begin{aligned}
&\langle\Omega|\mathcal{T}[\hat{x}(t_1)\hat{x}(t_2)]|\Omega\rangle\\
=&(-\mathrm{i}\hbar)^2\frac{\delta^2}{\delta J(t_1)\delta J(t_2)}Z[J]|_{J=0}\\
=&x_c(t_1)x_c(t_2)+\frac{\mathrm{i}\hbar}{m(t_b-t_a)}[\Theta(t_2-t_1)(t_b-t_2)(t_1-t_a)\\
&+\Theta(t_1-t_2)(t_b-t_1)(t_2-t_a)].
\end{aligned}
\tag{4.76}
$$

式中不含 $\hbar$ 的部分为 $\hat{x}(t_1)$ 与 $\hat{x}(t_2)$ 的期待值乘积 (见 (4.75) 式)，而含 $\hbar$ 的部分正好反映体系的量子性质, 相当于时序乘积的连通部分, 称为格林函数的连通部分, 即

$$\begin{aligned}
&\langle \Omega|\, \mathcal{T}[\hat{x}(t_1)\hat{x}(t_2)]\, |\Omega\rangle_c \\
\equiv&\langle \Omega|\, \mathcal{T}[\hat{x}(t_1)\hat{x}(t_2)]\, |\Omega\rangle - x_{cl}(t_1)x_{cl}(t_2) \\
=&-\hbar^2\left[\frac{1}{Z[J]}\frac{\delta^2 Z[J]}{\delta J[t_1]\delta J[t_2]}-\frac{1}{Z[J]^2}\frac{\delta Z[J]}{\delta J[t_1]}\frac{\delta Z[J]}{\delta J[t_2]}\right]\Big|_{J=0} \\
=&-\hbar^2\left[\frac{\delta^2 \ln Z[J]}{\delta J[t_1]\delta J[t_2]}\Big|_{J=0}\right].
\end{aligned}\tag{4.77}$$

进一步引入连通格林函数生成泛函:

$$W[J]=-\mathrm{i}\hbar\ln Z[J],\quad 或\quad Z[J]=\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}W[J]\right\},\tag{4.78}$$

则格林函数的连通部分变为

$$\begin{aligned}
&\langle \Omega|\, \mathcal{T}[\hat{x}(t_1)\hat{x}(t_2)]\, |\Omega\rangle_c \\
=&-\mathrm{i}\hbar\frac{\delta^2}{\delta J[t_1]\delta J[t_2]}W[J] \\
=&\frac{\mathrm{i}\hbar}{m(t_b-t_a)}[\Theta(t_2-t_1)(t_b-t_2)(t_1-t_a) \\
&+\Theta(t_1-t_2)(t_b-t_1)(t_2-t_a)] \\
=&\langle \Omega|\, \mathcal{T}[(\hat{x}-x_c)(t_1)(\hat{x}-x_c)(t_2)]\, |\Omega\rangle.
\end{aligned}\tag{4.79}$$

因为 $\langle \Omega|\, \hat{x}-x_c\, |\Omega\rangle=0$, 因此格林函数的连通部分亦称为连通关联函数, 即相对 x_c 的关联函数.

谐振子背景下的微扰级数展开与 Wick 定理　下面以谐振子为背景的微扰展开. 谐振子体系的费恩曼传播函数

$$\begin{aligned}
K_H(x_b,t_b;x_a,t_a)=&\mathcal{N}\int_{x_a}^{x_b}\mathrm{D}x(t)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\left(\frac{1}{2}m\dot{x}^2+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)} \\
=&\left(\frac{m\omega}{\mathrm{i}2\pi\hbar\sin(\omega T)}\right)^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{m\omega}{2\sin(\omega T)}[\cos(\omega T)(x_b^2+x_a^2)+2x_bx_a]},
\end{aligned}\tag{4.80}$$

谐振子体系的量子配分函数

$$\begin{aligned}
Z_H(T)=&\int \mathrm{d}xK_H(x,T;x,0) \\
=&\int_{x(t_a)=x(t_b)}\mathrm{D}x(t)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t(\frac{1}{2}m\dot{x}^2+\frac{1}{2}m\omega^2x^2)},
\end{aligned}\tag{4.81}$$

谐振子多点格林函数 (如 (4.64) 式)

$$\langle \Omega | T[\hat{x}(t_1)\cdots\hat{x}(t_n)] | \Omega \rangle = \frac{\displaystyle\int_{x(t_a)=x(t_b)} \mathrm{D}x(t)x(t_1)\cdots x(t_n)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\left(\frac{1}{2}m\dot{x}^2+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)}}{\displaystyle\int_{x(t_a)=x(t_b)} \mathrm{D}x(t)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\left(\frac{1}{2}m\dot{x}^2+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)}}. \tag{4.82}$$

计算其分母, 即得

$$Z_H(T) = \frac{1}{2\mathrm{i}\sin\frac{\omega T}{2}}.$$

为计算分子部分, 引入格林函数生成泛函

$$\begin{aligned} Z[J] &= \frac{1}{Z_H(T)}\int_{x(-\frac{T}{2})=x(\frac{T}{2})} \mathrm{D}x(t)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}}\mathrm{d}t\left(\frac{1}{2}m\dot{x}^2+\frac{1}{2}m\omega^2x^2+J(t)x\right)} \\ &= \langle \Omega | T\left[\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}}\mathrm{d}tJ(t)\hat{x}(t)}\right] | \Omega \rangle, \end{aligned} \tag{4.83}$$

即为在外力场中的谐振子, 正如 2.2 中分析, 用稳相近似方法, 可将结果表达为

$$Z[J] = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S^J[x_c(t)]}, \tag{4.84}$$

其中, $x_c(t)$ 为满足 $\delta S^J = 0$ 的极值方程的特解, 即

$$\left(m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2} + m\omega^2\right)x(t) = J(t), \quad x\left(-\frac{T}{2}\right) = x\left(\frac{T}{2}\right), \quad \dot{x}\left(-\frac{T}{2}\right) = \dot{x}\left(\frac{T}{2}\right), \tag{4.85}$$

$$x_c(t) = \frac{1}{m}\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \mathrm{d}t' G(t-t')J(t'). \tag{4.86}$$

$G(t)$ 为满足下面方程的格林函数:

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2} + \omega^2\right)G(t) = -\delta(t), \quad G\left(-\frac{T}{2}\right) = G\left(\frac{T}{2}\right), \quad \dot{G}\left(-\frac{T}{2}\right) = \dot{G}\left(\frac{T}{2}\right), \tag{4.87}$$

其解为 (参见 (2.52)~(2.57) 式)

$$G_F(t-t') = \frac{1}{2\mathrm{i}\omega}\left(\Theta(t-t')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')} + \Theta(t'-t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega(t-t')}\right), \tag{4.88}$$

其傅里叶变换为

$$\mathcal{G}_F(k) = \lim_{\epsilon\to 0^+}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\frac{1}{k^2-\omega^2+\mathrm{i}\epsilon}. \tag{4.89}$$

于是

$$
\begin{aligned}
S^J[x_c(t)] &= \int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t \left(\frac{1}{2} m\dot{x}^2 - \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 + J(t) x \right)|_{cl} \\
&= \left[\frac{1}{2} m x \dot{x} \Big|_{t_a}^{t_b} - \frac{1}{2} \int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t x \left(m \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2} + m\omega^2 \right) x \right] \Big|_{cl} + \int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t J x|_{cl} \\
&= \frac{1}{2} \int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t J x_c(t) \\
&= \frac{1}{2m} \int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t \mathrm{d}t' J(t) G(t-t') J(t'),
\end{aligned}
\tag{4.90}
$$

因此

$$
\begin{aligned}
Z[J] &= \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} W[J]} = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \frac{1}{2m} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \mathrm{d}t \mathrm{d}t' J(t) G(t-t') J(t')} \\
&= \langle \Omega | \mathcal{T} \left[\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \mathrm{d}t J(t) \hat{x}(t)} \right] | \Omega \rangle_c .
\end{aligned}
\tag{4.91}
$$

对 (4.91) 式两边作泛函变分, 再取 $J=0$ 极限, 得

$$
\langle \Omega | \mathcal{T}[\hat{x}(t_1) \cdots \hat{x}(t_k)] | \Omega \rangle_c = \prod_{j=1}^{k} \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\delta}{\delta J(t_i)} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \frac{1}{2m} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \mathrm{d}t \mathrm{d}t' J(t) G(t-t') J(t')} \Big|_{J=0} . \tag{4.92}
$$

特别是两点格林函数

$$
\langle \Omega | \mathcal{T}[\hat{x}(t_1) \hat{x}(t_2)] | \Omega \rangle_c = \frac{\hbar}{\mathrm{i}m} G(t_1 - t_2). \tag{4.93}
$$

对于多点格林函数, 当取多重泛函变分后令 $J=0$ 时, 剩余项为完全配对的两点函数的乘积, 于是得到格林函数微扰展开的重要定理 —— Wick 定理:

$$
\begin{aligned}
&\langle \Omega | \mathcal{T}[\hat{x}(t_1) \cdots \hat{x}(t_{2k})] | \Omega \rangle_c \\
&= \sum_{(a_1, \cdots, a_{2k})\text{中所有可能对}(a,a')\text{完全配对}} \prod_{(a,a')} \left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}m} G_{a,a'} \right) \\
&= \sum_{p(1,2,\cdots,2k)} \langle \Omega | \mathcal{T}[\hat{x}_{p_1}, \hat{x}_{p_2}] | \Omega \rangle_c \cdots \langle \Omega | \mathcal{T}[\hat{x}_{p_{2k-1}}, \hat{x}_{p_{2k}}] | \Omega_c \rangle .
\end{aligned}
\tag{4.94}
$$

即所有格林函数即关联函数都能用两点函数的乘积来表达.

4.4 散射 S 矩阵、相互作用绘景、关联函数的路径积分表述

散射矩阵 前面几节主要分析了束缚态问题, 本节我们着重讨论散射问题. 散射问题主要是处理连续谱, 因此, 我们重点分析具有特殊渐近行为的连续谱波函数及相应格林函数, $\boldsymbol{S}$ 矩阵及其路径积分表述.

孤立体系中态的演化由幺正算子决定, 用薛定谔绘景描述, 则

$$|\psi(t)\rangle_s = \hat{U}(t,t')|\psi(t')\rangle_s. \tag{4.95}$$

演化算子满足

$$\hat{U}(t,t')\hat{U}^+(t,t') = I, \quad U(t,t) = I, \tag{4.96}$$

和薛定谔方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t,t') = \hat{H}(t)\hat{U}(t,t'), \tag{4.97}$$

这里哈密顿算子 $\hat{H}(t)$ 为厄米算子. 对于保守体系, 哈密顿量不显含时间, 上式可形式解出, 所以演化算子可表示为

$$\hat{U}(t,t') = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}(t-t')}. \tag{4.98}$$

保守体系具有平移不变性, $\dfrac{\hat{H}}{\hbar}$ 为时间平移算子生成元.

设一般的含时体系哈密顿量为

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x,t) \equiv H_0 + V, \tag{4.99}$$

相互作用绘景 对含时间微扰理论, 用相互作用绘景较为方便, 这里作为绘景描述的补充内容作一简单介绍.

如 (4.99) 式, 先将哈密顿量分为两部分, 即自由粒子部分 H_0 和相互作用部分 V, 则在相互作用绘景 (用下标 I 表示) 中, 态矢定义为

$$|\psi(t)\rangle_I = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}_0 t}|\psi(t)\rangle_s \tag{4.100}$$

而算子定义为

$$\tilde{O}(t) = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}_0 t}O_s\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}_0 t}. \tag{4.101}$$

它们的运动方程为 (为简单起见, 设力学量算子 O_s 不显含时间)

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\tilde{O}(t) = [\tilde{O}(t), \hat{H}_0] = [\tilde{O}(t), \tilde{H}_0], \tag{4.102}$$

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle_I &= \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}_0 t}\hat{H}|\psi(t)\rangle_s - \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}_0 t}\hat{H}_0|\psi(t)\rangle_s \\ &= \tilde{V}(t)|\psi(t)\rangle_I,\end{aligned} \tag{4.103}$$

即在相互作用绘景, 算子的时间演化仅与哈密顿量的自由部分 $\tilde{H}_0 = \hat{H}_0$ 有关, 而态矢的时间演化与哈密顿量的相互作用部分 $\tilde{V}(t)$ 有关.

假定势 $V(x,t)$ 在经典轨道上当 $|t|\to\infty$ 时衰减非常快, 即渐近趋近于自由运动, 则散射矩阵 S 定义为在相互作用绘景中演化算子在 $|t|\to\infty$ 时的极限:

$$S=\lim_{\substack{t_a\to-\infty\\ t_b\to\infty}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}_0t_b}\hat{U}(t_b,t_a)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}_0t_a}. \tag{4.104}$$

为了要求 $|t|\to\infty$ 时的极限存在, $\hat{U}(t_b,t_a)$ 两边乘以自由演化算子是必须的. 按此定义, 当散射势 $V=0, H=H_0$, S 为恒等算子, 另外, 可以证明, 只要 $|t|\to\infty$ 时 $V(x,t)$ 衰减足够快, 如上定义的 S 矩阵极限存在.

在相互作用绘景中态矢随时间的演化表示为

$$|\psi(t)\rangle_I=\varOmega(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle_I, \tag{4.105}$$

其中, $\Omega(t,t_0)$ 是时间演化算子

$$\varOmega(t,t_0)=\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}_0t}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}t}, \tag{4.106}$$

它满足

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\varOmega(t,t_0)=\tilde{V}(t)\varOmega(t,t_0),\quad \varOmega(t_0,t_0)=1, \tag{4.107}$$

其形式解为

$$\varOmega(t,t_0)=1-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^t\mathrm{d}t_1\tilde{V}(t_1)\varOmega(t_1,t_0). \tag{4.108}$$

(4.108) 式为积分方程, 当将位势看成微扰, 可用逐级迭代法求解, 即假定 $V=H-H_0\sim\epsilon$, 则

一级近似

$$\varOmega(t,t_0)=1-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^t\mathrm{d}t_1\tilde{V}(t_1)+O(\epsilon^2).$$

二级近似

$$\varOmega(t,t_0)=1-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^t\mathrm{d}t_1\tilde{V}(t_1)+\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\right)^2\int_{t_0}^t\mathrm{d}t_1\tilde{V}(t_1)\int_{t_0}^{t_1}\mathrm{d}t_2\tilde{V}(t_2)+O(\epsilon^3). \tag{4.109}$$

注意在 (4.109) 式右边第三项重积分中要永远保持 $t_1>t_2$, 且由于不同时间算子相互不可对易, 所以此项也可表示为

$$\int_{t_0}^t\mathrm{d}t_1\int_{t_0}^{t_1}\mathrm{d}t_2\tilde{V}(t_1)\tilde{V}(t_2)=\frac{1}{2}\int_{t_0}^t\mathrm{d}t_1\int_{t_0}^t\mathrm{d}t_2\mathcal{T}[\tilde{V}(t_1)\tilde{V}(t_2)], \tag{4.110}$$

其中, $\mathcal{T}$ 代表编时乘积. 推广到高级近似情况, 各算子应按时间顺序排列, 时间大的算子放左边. 这样用逐次迭代后可证

$$\begin{aligned}\varOmega(t,t_0)&=\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{-\mathrm{i}}{\hbar}\right)^n\frac{1}{n!}\int_{t_0}^t\mathrm{d}t_1\cdots\mathrm{d}t_n\mathcal{T}[\tilde{V}(t_1)\cdots\tilde{V}(t_n)]\\&=\mathcal{T}\left[\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^t\mathrm{d}t\tilde{V}(t)}\right].\end{aligned} \tag{4.111}$$

类似 4.3 节分析计算演化算子的微扰级数展开, 类似 (4.65) 式, 可将散射矩阵 S 表示为

$$S=\lim_{T\to\infty}\langle\Omega|\mathcal{T}\left[\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}}\mathrm{d}t\tilde{V}(t)}\right]|\Omega\rangle. \tag{4.112}$$

本节并不打算深入介绍有关 S 矩阵的一般性理论, 而仅以库仑势散射为例说明路径积分方法的应用.

库仑势散射与卢瑟福公式 对于三维空间库仑势散射, 粒子从初态 $\psi_i(\boldsymbol{x}_a,t)$ 经库仑势散射跃迁到末态 $\psi_f(\boldsymbol{x}_b,t)$ 的跃迁振幅为

$$A=\int\mathrm{d}\boldsymbol{x}_b\int\mathrm{d}\boldsymbol{x}_a\psi_f^*(\boldsymbol{x}_b,t_b)K(\boldsymbol{x}_b,t_b;\boldsymbol{x}_a,t_a)\psi_i(\boldsymbol{x}_a,t_a). \tag{4.113}$$

为方便, 初末态波函数采用立方体 $V=L^3$ 归一化平面波, 则

$$\psi(\boldsymbol{x},t)=\frac{1}{\sqrt{V}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\mathrm{i}\frac{Et}{\hbar}},\quad E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}>0,\quad\int_V\mathrm{d}\boldsymbol{x}\psi^*\psi=1, \tag{4.114}$$

而相互作用采用时间正则化库仑势为

$$V(\boldsymbol{x},t)=\frac{\alpha}{r}\mathrm{e}^{-4\frac{t^2}{T^2}},\quad\alpha=\frac{\mathrm{e}^2}{4\pi}\approx\frac{1}{137}, \tag{4.115}$$

其中 T 为很大但有限的时间.

有了上述准备之后, 将费恩曼传播函数路径积分在经典轨道周围展开, 这相当于取玻恩 (Born) 近似

$$\begin{aligned}A=&\int\mathrm{d}\boldsymbol{x}_b\int\mathrm{d}\boldsymbol{x}_a\int\mathrm{d}t\int\mathrm{d}\boldsymbol{x}\psi_f^*(\boldsymbol{x}_b,t_b)K_0(\boldsymbol{x}_b,t_b;\boldsymbol{x},t)\\&\times\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\right)V(\boldsymbol{x},t)K_0(\boldsymbol{x},t;\boldsymbol{x}_a,t_a)\psi_i(\boldsymbol{x}_a,t_a)\end{aligned} \tag{4.116}$$

在一维空间有 (以下为简化取 $\hbar=1$)

$$\begin{aligned}K_0(x_b,t_b;x_a,t_a)&=\frac{m}{\mathrm{i}2\pi t}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{mx^2}{2t}}\quad(t=t_b-t_a,\quad x=x_b-x_a)\\&=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p\mathrm{e}^{\mathrm{i}px-\mathrm{i}\frac{p^2}{2m}t},\end{aligned}$$

推广到三维空间得

$$K_0(\boldsymbol{x}_b,t_b;\boldsymbol{x}_a,t_a)=\frac{1}{(2\pi)^3}\int\mathrm{d}\boldsymbol{q}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{x}_b-\boldsymbol{x})-\mathrm{i}\frac{q^2}{2m}(t_b-t)}. \tag{4.117}$$

设入射粒子动量为 $\boldsymbol{k}$, 出射粒子动量为 $\boldsymbol{p}$, 则初末态波函数

$$\psi_i(\boldsymbol{x}_a,t_a)=\frac{1}{\sqrt{V}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}_a-\mathrm{i}\frac{k^2}{2m}t_a},\quad\psi_f(\boldsymbol{x}_b,t_b)=\frac{1}{\sqrt{V}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}_b-\mathrm{i}\frac{p^2}{2m}t_b}. \tag{4.118}$$

将以上各式代入 (4.116) 式得

$$A(\boldsymbol{p},\boldsymbol{k};T)=\int \mathrm{d}\boldsymbol{x}_b\int \mathrm{d}\boldsymbol{x}_a\int \mathrm{d}t\int \mathrm{d}\boldsymbol{x}\int \mathrm{d}\boldsymbol{q}\int \mathrm{d}\boldsymbol{q}'\frac{1}{V}\frac{1}{(2\pi)^6}\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\right)V(\boldsymbol{x},t)\exp\{B\}$$

$$\begin{aligned}B=&-\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}_b+\mathrm{i}\frac{p^2}{2m}t_b+\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{x}_b-\boldsymbol{x})-\mathrm{i}\frac{q^2}{2m}(t_b-t)\\&+\mathrm{i}\boldsymbol{q}'\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_a)-\mathrm{i}\frac{{q'}^2}{2m}(t-t_a)+\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}_a-\mathrm{i}\frac{k^2}{2m}t_a.\end{aligned}$$

注意到上式与 $\boldsymbol{x}_a$ 及 $\boldsymbol{x}_b$ 均为线性关系, 对 $\mathrm{d}\boldsymbol{x}_b$ 及 $\mathrm{d}\boldsymbol{x}_a$ 积分, 得 $(2\pi)^6\delta(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{p})\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}')$, 再对 $\mathrm{d}\boldsymbol{q}$ 及 $\mathrm{d}\boldsymbol{q}'$ 积分, 则有

$$A(\boldsymbol{p},\boldsymbol{k};T)=\int \mathrm{d}t\int \mathrm{d}\boldsymbol{x}\frac{-\mathrm{i}}{V\hbar}V(\boldsymbol{x},t)\exp\left\{-\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}+\mathrm{i}\frac{p^2}{2m}t+\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}+\mathrm{i}\frac{k^2}{2m}t\right\}.$$

再将势 (4.115) 式代入, 得

$$A(\boldsymbol{p},\boldsymbol{k};T)=\frac{-\mathrm{i}}{V\hbar}\int \mathrm{d}\boldsymbol{x}\frac{\alpha}{r}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{x}}\int \mathrm{d}t\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{p^2-k^2}{2m}t-\frac{4t^2}{T^2}}.$$

进一步引用屏蔽库仑势

$$\frac{\alpha}{r}\to\frac{\alpha}{r}\mathrm{e}^{-Mr},$$

并注意

$$\int \mathrm{d}x\frac{\alpha}{r}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{x}-Mr}=\frac{4\pi}{(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{p})^2+M^2},$$

则有 (参见附录 A.3)

$$A(\boldsymbol{p},\boldsymbol{k};T)=-\frac{\mathrm{i}\alpha}{V\hbar}\frac{4\pi}{(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{p})^2+M^2}\mathrm{e}^{-\left(\frac{p^2-k^2}{2m}\right)^2\frac{T^2}{16}}\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}}\mathrm{e}^{-\frac{4t^2}{T^2}}\mathrm{d}t.$$

单位时间跃迁概率

$$\chi=\frac{|A|^2}{\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}}\mathrm{e}^{-\frac{4t^2}{T^2}}}=\frac{\alpha^2}{V^2\hbar^2}\frac{16\pi^2}{[(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{p})^2+M^2]^2}\mathrm{e}^{-\left(\frac{p^2-k^2}{2m}\right)^2\frac{T^2}{8}}\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}}\mathrm{e}^{-\frac{4t^2}{T^2}}\mathrm{d}t.$$

在取 $T\to\infty$ 极限下, 注意到 (参见附录 B.13)

$$\delta(k)=\lim_{T\to\infty}\frac{T}{\sqrt{\pi}}\mathrm{e}^{-k^2T^2}$$

后, 有

$$\chi=\frac{\alpha^2}{V^2\hbar^2}\frac{16\pi^2}{[(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{p})^2+M^2]^2}2\pi\delta\left(\frac{p^2-k^2}{2m}\right).$$

又因为

$$\int \mathrm{d}\boldsymbol{p}\ \delta\left(\frac{p^2-k^2}{2m}\right)=\int mp\ \mathrm{d}\frac{p^3}{2m}\ \mathrm{d}\Omega\ \delta\left(\frac{p^2-k^2}{2m}\right)=m\sqrt{2mE}\int \mathrm{d}\Omega,$$

且当 $p^2 = k^2$ 时,

$$(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{p})^2 = 2k^2(1 - \cos\theta) = 4k^2 \sin^2\frac{\theta}{2},$$

所以总散射截面为

$$\begin{aligned}\sigma &= \int \mathrm{d}\boldsymbol{p} \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{Vm}{k} \frac{A^2}{T} \\ &= \int \frac{m^2\alpha^2}{4k^4 \sin^4 \dfrac{\theta}{2}} \mathrm{d}\Omega,\end{aligned}$$

最后可得到

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{m^2\alpha^2}{4k^4 \sin^4 \dfrac{\theta}{2}}, \tag{4.119}$$

这与经典理论卢瑟福 (Rutherford) 公式相同.

值得说明的是, 正因为库仑势可以精确求解, 故由一级近似玻恩公式便可得到精确结果, 且与经典理论卢瑟福公式相同.

习　题　4

1. 已知自由粒子费恩曼传播函数

$$K_0(x_b, t_b; x_a, t_a) = \frac{m}{\mathrm{i}2\pi\hbar(t_b - t_a)} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{m}{2}\frac{(x_b - x_a)^2}{t_b - t_a}},$$

请用其傅里叶变换导出一维自由粒子的格林函数

$$\begin{aligned}\mathcal{G}_0(x_b, x_a; E) &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}T \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}ET} K_0(x_b, x_a; T)\Theta(T) \\ &= \frac{m}{\mathrm{i}2\pi\hbar} \int_0^{\infty} \frac{\mathrm{d}T}{\sqrt{T}} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{m}{2}\frac{x^2}{T} + \frac{\mathrm{i}}{\hbar}ET} \\ &= \frac{m}{2E} \mathrm{e}^{\mathrm{i}k|x|}, \quad x = x_b - x_a, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\end{aligned}$$

2. 一维 δ 函数势: $V(x) = \alpha\delta(x)$, α 取负值, 即 δ 势阱, 请用路径积分微扰法计算束缚态能级和波函数.

3. 一维非谐和振子势: $V(x) = \dfrac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \dfrac{\lambda}{4!}x^4$, λ 为小量, 请用路径积分微扰法计算其基态能量的一级修正.

第 5 章　一般坐标系中的路径积分, 氢原子问题

对于非相对论性量子力学问题, 费恩曼路径积分理论在谐振子问题、量子电动力学问题和统计物理问题等方面早已得到非常广泛的应用, 而用路径积分方法对氢原子问题精确求解却遇到了很大的困难. 对于可以精确求解的氢原子问题, 最初路径积分方法只能用微扰的方法给出近似解, 这使得路径积分理论在量子力学中的应用一度受到很大的限制. 20 年前, Duru 和 Kleinert 利用 Kustaanheimo-Stiefel 变换, 获得了氢原子的精确解, 为路径积分理论在非相对论性量子力学中的应用打开了新的前景, 极大地推动了路径积分理论在各个领域中的应用与发展. 本章主要分析一般坐标系中的路径积分及其坐标变换、算子序等问题, 并进一步介绍采用路径积分理论讨论氢原子的精确可解问题.

5.1　黎曼流形上的量子力学

黎曼流形上的经典力学　在 D 维黎曼流形 M 上, 流形度规

$$\mathrm{d}s^2 = g_{ab}(x)\mathrm{d}x^a\mathrm{d}x^b, \tag{5.1}$$

一般动力学体系的拉氏量

$$L(\dot{x}, x) = \frac{1}{2}\dot{x}^a g_{ab}\dot{x}^b - V(x), \tag{5.2}$$

共轭动量

$$p_a = \frac{\partial L(\dot{x}, x)}{\partial \dot{x}^a} = g_{ab}\dot{x}^b, \tag{5.3}$$

哈密顿量

$$\begin{aligned} H(p, x) &= p_a\dot{x}^a - L(\dot{x}, x) \\ &= \frac{1}{2}p_a g^{ab} p_b + V(x), \end{aligned} \tag{5.4}$$

其中, $g^{ab}(x)$ 为 $g_{ab}(x)$ 的逆矩阵元

$$g_{ac}g^{cb} = \delta_a^b.$$

黎曼流形上的薛定谔方程　现在遇到的首要问题是如何过渡到量子力学. 由于 (5.4) 式第一项中有算子序不确定性问题, 故常以如下形式的薛定谔方程作为量

子理论的出发点:

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=\left(\frac{\hbar^2}{2m}\mathbf{\Delta}_{LB}+V(x)\right)\psi(x,t), \tag{5.5}$$

其中, $\mathbf{\Delta}_{LB}$ 称为 Laplace-Beltrami 算子可具体表示为

$$\mathbf{\Delta}_{LB}=-\frac{1}{\sqrt{g}}\partial_a(\sqrt{g}g^{ab}\partial_b),\quad g=\det(g_{ab}). \tag{5.6}$$

例如, 在三维空间中心力场中运动粒子, 常采用球坐标

$$\mathrm{d}s^2=\mathrm{d}r^2+r^2\mathrm{d}\theta^2+r^2\sin^2\theta\mathrm{d}\phi^2, \tag{5.7}$$

度规张量为

$$g_{ab}=\mathrm{diag}(1,r^2,r^2\sin^2\theta), \tag{5.8}$$

其逆变张量为

$$g^{ab}=\mathrm{diag}\left(1,\frac{1}{r^2},\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\right). \tag{5.9}$$

这时

$$\sqrt{g}=r^2\sin\theta, \tag{5.10}$$

而球坐标 Laplace-Beltrami 算子表示为

$$\begin{aligned}\mathbf{\Delta}_{LB}=&-\frac{1}{r^2\sin\theta}\partial_a(r^2\sin\theta g^{ab}\partial_b)\\=&-\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)-\frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]\\=&-\mathbf{\nabla}_r^2-\frac{1}{r^2}\mathbf{\nabla}_\Omega^2.\end{aligned} \tag{5.11}$$

于是

$$\frac{\hbar^2}{2m}\mathbf{\Delta}_{LB}=\frac{p_r^2}{2m}+\frac{L^2}{2mr^2}=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right), \tag{5.12}$$

其中

$$p_r=-\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right) \tag{5.13}$$

和

$$L^2=-\frac{\hbar^2}{\sin^2\theta}\left[\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]. \tag{5.14}$$

总之, 在分析球坐标系下路径积分时, 仍需从笛卡儿坐标系下路径积分出发, 然后设法变换到球坐标表达式. 这是因为在球坐标系中, 量子化规则

$$\begin{aligned}&[r,p_r]=\mathrm{i}\hbar\quad(0\leqslant r<\infty)\\&[\theta,p_\theta]=\mathrm{i}\hbar\quad(0\leqslant\theta\leqslant\pi)\\&[\phi,p_\phi]=\mathrm{i}\hbar\quad(0\leqslant\phi<2\pi)\end{aligned} \tag{5.15}$$

是不存在的. 原因是满足 $[q,p]=\mathrm{i}\hbar$ 的量子算子的本征值必须分布在区间 $(-\infty,\ \infty)$, 而在球坐标系中 $0\leqslant r<\infty$ 的分布区域妨碍了 p_r 为可观测量, 即妨碍存在本征矢 $|p_r\rangle$. 换言之, 算子 p_r 为厄米仅当它作用于满足 $\lim\limits_{r\to 0} r\psi(r)=0$ 条件的平方可积函数时才成立, 而在此条件下 $p_r\psi(r)=\lambda\psi(r)$ 无解[①]. 所以, 在一般黎曼流形上, (5.5) 式和 (5.6) 式是量子力学出发点, 而不是 (5.4) 式和 (5.15) 式.

黎曼流形上的量子力学 对于黎曼流形上的坐标表象, 波函数间标积定义为

$$\langle\psi_1(t)|\psi_2(t)\rangle=\int \mathrm{d}^D\boldsymbol{x}\sqrt{g(\boldsymbol{x})}\psi_1^*(\boldsymbol{x},t)\psi_2(\boldsymbol{x},t). \tag{5.16}$$

用 $|x\rangle$ 表示坐标算子本征态

$$\hat{x}^a\,|x\rangle=x^a\,|x\rangle \tag{5.17}$$

满足正交归一和完备性条件

$$\begin{aligned}&\langle x_1|x_2\rangle=(g(\boldsymbol{x}_1)g(\boldsymbol{x}_2))^{-\frac{1}{4}}\delta^D(\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2),\\&\int \mathrm{d}^D\boldsymbol{x}\sqrt{g(\boldsymbol{x})}\,|x\rangle\,\langle x|=I.\end{aligned} \tag{5.18}$$

注意上面诸式中前置因子 $\sqrt{g(\boldsymbol{x})}$ 是由于黎曼流形测度所引起的.

用 $|p\rangle$ 表示动量算子 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 的本征态

$$\hat{p}_a\,|p\rangle=p_a\,|p\rangle\,, \tag{5.19}$$

则在坐标表象中动量本征函数为

$$\langle x|p\rangle=g(\boldsymbol{x})^{-\frac{1}{4}}(2\pi\hbar)^{-\frac{D}{2}}\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p}\right) \tag{5.20}$$

其复共轭为

$$\langle p|x\rangle=g(\boldsymbol{x})^{-\frac{1}{4}}(2\pi\hbar)^{-\frac{D}{2}}\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p}\right). \tag{5.21}$$

所有动量的本征态满足正交归一和完备性条件

$$\begin{aligned}&\langle p_1|p_2\rangle=\delta(\boldsymbol{p}_1-\boldsymbol{p}_2),\\&\int \mathrm{d}^D\boldsymbol{p}\,|p\rangle\,\langle p|=I.\end{aligned}$$

黎曼流形上的哈密顿算子 还需要注意的是, 坐标表象与动量表象之间具有不对称性, 这是由于黎曼流形测度引起的, 因为流形本身是通过坐标表象来定义的,

① Messiah A, Temmer G M. 1972. Quantum Mechanics. Amsterdam: North-Holland Publishing Company, 346.

而动量空间则是流形的余切空间. 正是这种表象间的不对称性导致了动量算子 $\hat{p}_a$ 在坐标表象中的算子形式上有变化.

$$\hat{p}_a = -\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x^a} + \frac{1}{2}\Gamma_a\right), \quad \Gamma_a = \frac{\partial \ln\sqrt{g}}{\partial x^a}. \tag{5.22}$$

关于这一点, 可证明如下:

$$\begin{aligned}
\langle x|\hat{p}_a|\psi(t)\rangle &= \int \mathrm{d}^D\boldsymbol{p}\int \mathrm{d}^D\boldsymbol{y}\sqrt{g(\boldsymbol{y})}\,\langle x|\hat{p}_a|p\rangle\,\langle p|y\rangle\,\langle y|\psi(t)\rangle \\
&= g(\boldsymbol{x})^{-\frac{1}{4}}\int \mathrm{d}^D\boldsymbol{y}g(\boldsymbol{y})^{\frac{1}{4}}\int \frac{\mathrm{d}^D\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^D}p_a\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})\cdot\boldsymbol{p}\right\}\psi(y,t) \\
&= -\mathrm{i}\hbar g(\boldsymbol{x})^{-\frac{1}{4}}\frac{\partial}{\partial x^a}\left(\int \mathrm{d}^D\boldsymbol{y}g(\boldsymbol{y})^{\frac{1}{4}}\int \frac{\mathrm{d}^D\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^D}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})\cdot\boldsymbol{p}\right\}\psi(y,t)\right) \\
&= -\mathrm{i}\hbar g(\boldsymbol{x})^{-\frac{1}{4}}\frac{\partial}{\partial x^a}\left(g(\boldsymbol{x})^{\frac{1}{4}}\psi(x,t)\right) \\
&= -\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x^a} + \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x^a}\ln\sqrt{g(\boldsymbol{x})}\right)\psi(x,t).
\end{aligned} \tag{5.23}$$

因此, 在坐标表象下, Laplace-Beltrami 算子的显式为

$$\boldsymbol{\Delta}_{LB} = -\frac{1}{\sqrt{g}}\partial_a(\sqrt{g}g^{ab}\partial_b) = -g^{ab}\partial_a\partial_b - (g^{ab}\Gamma_a + g^{ab}_{,a})\partial_b, \tag{5.24}$$

其中, $g^{ab}_{,a} = \dfrac{\partial g^{ab}}{\partial x^a}$. 哈密顿算符为

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\Delta}_{LB} + V(x). \tag{5.25}$$

Weyl 序与 Q-P 序 将哈密顿算子 $\hat{H}$ 用动量算子 (5.22) 式表达时很繁, 会遇到坐标及动量算子的次序问题, 下面给出两种常用的表达式.

(1) Weyl 序

$$(g^{ab}(x)p_ap_b)|_W = \frac{1}{4}\left(g^{ab}(x)p_ap_b + 2p_ag^{ab}(x)p_b + p_ap_bg^{ab}(x)\right). \tag{5.26}$$

哈密顿算符在 Weyl 序中表示为

$$\begin{aligned}
H &= \frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\Delta}_{LB} + V(x) \\
&= \frac{1}{8m}\left(g^{ab}p_ap_b + 2p_ag^{ab}p_b + p_ap_bg^{ab}\right) + V(x) + \boldsymbol{\Delta}V_W(x),
\end{aligned} \tag{5.27}$$

其中,

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\Delta}V_W &= \frac{\hbar^2}{8m}\left[g^{ab}\Gamma_a\Gamma_b + 2(g^{ab}\Gamma_a)_{,b} + 2g^{ab}_{,ab}\right] \\
&= \frac{\hbar^2}{8m}\left(g^{ab}\Gamma^d_{ac}\Gamma^c_{bd} + \mathcal{R}\right),
\end{aligned} \tag{5.28}$$

为采用 Weyl 序时势的改正项. $\mathcal{R}$ 为标曲率

$$\mathcal{R} = g^{ij}(\Gamma^l_{ij,l} - \Gamma^l_{lj,i} - \Gamma^l_{mj}\Gamma^m_{il} + \Gamma^l_{ij}\Gamma^m_{ml}), \tag{5.29}$$

Γ 为联络, 即

$$\Gamma^i_{jk} = \frac{1}{2}g^{il}(g_{jl,k} + g_{kl,j} - g_{jk,l}). \tag{5.30}$$

(2) Q-P 序 (标准序 standard ordering).

标准序中哈密顿算符表示为

$$\begin{aligned} H &= \frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\Delta}_{LB} + V(x) \\ &= \frac{1}{2m}(g^{ab}\hat{p}_a\hat{p}_b - \mathrm{i}\hbar K^a\hat{p}_a) + V(x) + \boldsymbol{\Delta}V_s(x), \end{aligned} \tag{5.31}$$

其中,

$$K^a(x) = g^{ab}_{,b} - g^{ab}\Gamma_b \tag{5.32}$$

和

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Delta}V_s &= \frac{\hbar^2}{2m}\left(g^{ab}_{,a}\Gamma_b + g^{ab}\Gamma_{a,b}\right) \\ &= \frac{\hbar^2}{2m}\partial_a\left(g^{ab}\Gamma_b\right). \end{aligned} \tag{5.33}$$

它们都是当采用标准序时势的改正项. 下节将着重分析这些问题.

5.2　路径积分中的算子序问题、中点描写与末点描写

由于坐标与动量不可交换, 正则量子化并不唯一. 因此需要依靠理论分析 (如要求算子具有厄米性等), 或依靠实验去判断何者正确, 路径积分量子化也未解决此困难. 对于短时传播函数, 算子序以及离散函数的取值与中点、终点或起点描写有关, 且会造成量子改正. Weyl 序常和中点描写相关, 而 Q-P 序则与末点描写有关, 下面来分析此问题.

中点描写与末点描写　当给定经典哈密顿量 $H(p,q)$, 其傅里叶变换

$$\mathcal{H}(u,v) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^D}\int \mathrm{d}p\mathrm{d}q \exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(u\cdot p + v\cdot q)\right\} H(p,q), \tag{5.34}$$

相应的 “逆变换”

$$\hat{H}(\hat{p},\hat{q}) = \int \mathrm{d}u\mathrm{d}v \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}v\cdot\hat{q}\right\} \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}u\cdot\hat{p}\right\} \mathcal{H}(u,v), \tag{5.35}$$

或

$$\hat{H}(\hat{p},\hat{q})=\int \mathrm{d}u\mathrm{d}v \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(u\hat{p}+v\hat{q})\right\}\mathcal{H}(u,v). \tag{5.36}$$

后者相当于取 Weyl 序, 前者相当于取 Q-P 序. 注意到 BCH 公式

$$\exp\{\hat{A}+\hat{B}\}=\exp\{\hat{A}\}\exp\{\hat{B}\}\exp\left\{-\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]\right\},\quad 当[\hat{A},\hat{B}]=\text{constant}, \tag{5.37}$$

Q-P 序 ((5.35) 式) 也可记为

$$\hat{H}(\hat{p},\hat{q})=\int \mathrm{d}u\mathrm{d}v \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(u\hat{p}+v\hat{q})\right\}\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{2\hbar}uv\right\}\mathcal{H}(u,v). \tag{5.38}$$

在量子力学的路径积分公式中, 主要处理的是无穷小跃迁振幅的计算以及指数函数的泰勒展开. 首先来分析 Weyl 序.

Weyl 序 利用归纳法可证

$$(\hat{q}^m\hat{p}^n)_W=\frac{1}{2^m}\sum_{l=0}^{m}\frac{m!}{(m-l)!l!}\hat{q}^{m-l}\hat{p}^n\hat{q}^l, \tag{5.39}$$

故有

$$\begin{aligned}\langle q_b|(\hat{q}^m\hat{p}^n)_W|q_a\rangle&=\frac{1}{2^m}\sum_{l=0}^{m}\frac{m!}{(m-l)!l!}q_b^{m-l}q_a^l\langle q_b|\hat{p}^n|q_a\rangle\\&=\left[\frac{1}{2}(q_b+q_a)\right]^m\langle q_b|\hat{p}^n|q_a\rangle.\end{aligned} \tag{5.40}$$

因此, 对短时传播函数 (取到 $O(\epsilon)$) 有

$$\begin{aligned}&\langle x_j\mid\exp\left\{-\mathrm{i}\frac{\epsilon}{\hbar}H^W(\hat{p},\hat{x})\right\}\mid x_{j-1}\rangle\\&=\langle x_j\left|1-\mathrm{i}\frac{\epsilon}{\hbar}H^W(\hat{p},\hat{x})\right|x_{j-1}\rangle\\&=(g(x_j)g(x_{j-1}))^{-\frac{1}{4}}\int\frac{\mathrm{d}p}{2\pi\hbar}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p(x_j-x_{j-1})\right\}\\&\quad\times\left(1-\mathrm{i}\frac{\epsilon}{\hbar}H^W\left(p,\frac{1}{2}(x_j+x_{j-1})\right)\right)\\&=(g(x_j)g(x_{j-1}))^{-\frac{1}{4}}\int\frac{\mathrm{d}p}{2\pi\hbar}\\&\quad\times\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[p(\boldsymbol{\Delta}x_j-\epsilon H^W(p,\bar{x}_j))]\right\},\end{aligned} \tag{5.41}$$

其中,

$$\boldsymbol{\Delta}x_j=x_j-x_{j-1},\quad \bar{x}_j=\frac{1}{2}(x_j+x_{j-1}). \tag{5.42}$$

所以得到如下结果:

$$
\begin{aligned}
&\langle x_b|\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}H^W(\hat{p},\hat{x})(t_b-t_a)\right\}|x_a\rangle \\
&=(g(x_a)g(x_b))^{-\frac{1}{4}}\lim_{N\to\infty}\int\prod_1^{N-1}\mathrm{d}^Dx_j\prod_1^N\frac{\mathrm{d}^D\boldsymbol{p}_j}{(2\pi\hbar)^D} \\
&\quad\times\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_j\left[p_j\boldsymbol{\Delta}x_j-\epsilon H^W(p_j,\vec{x_j})\right]\right\} \\
&=(g(x_a)g(x_b))^{-\frac{1}{4}}\lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\epsilon}\right)^{\frac{ND}{2}}\int\prod_1^{N-1}\mathrm{d}^Dx_j\prod_1^N g(\bar{x}_n)^{\frac{1}{2}} \\
&\quad\times\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_1^{N-1}\left[\frac{1}{2m\epsilon}\boldsymbol{\Delta}x_n^a g_{ab}(\vec{x_n})\boldsymbol{\Delta}x_n^b-\epsilon(\boldsymbol{\Delta}V_W(x_n)+V(x_n))\right]\right\}. \qquad (5.43)
\end{aligned}
$$

Q-P 序 (标准序) 类似地对于 Q-P 序有 (见 28 页短核的计算)

$$
\begin{aligned}
&\langle x_j\mid\exp\left\{-\mathrm{i}\frac{\epsilon}{\hbar}H^S(\hat{p},\hat{x})\right\}\mid x_{j-1}\rangle \\
&=(g(x_j)g(x_{j-1}))^{-\frac{1}{4}}\int\frac{\mathrm{d}^D\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^D} \\
&\quad\times\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[p_a\boldsymbol{\Delta}x_j^a-\frac{\epsilon}{2m}(g^{ab}(x_j)p_ap_b-\mathrm{i}\hbar K^a(x_j)p_a)-\epsilon V(x_j)\right]\right\} \\
&=\left(\frac{g(x_j)}{g(x_{j-1})}\right)^{\frac{1}{4}}\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\epsilon}\right)^{\frac{D}{2}}\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{m}{2\epsilon}\left(\boldsymbol{\Delta}x_j+\frac{\mathrm{i}\hbar\epsilon}{2m}K(x_j)\right)^2+\frac{\mathrm{i}\epsilon}{\hbar}V_T(x_j)\right], \qquad (5.44)
\end{aligned}
$$

其中,

$$
\begin{aligned}
&V_T(x_j)=V(x_j)+\boldsymbol{\Delta}V_s(x_j) \\
&\left(\boldsymbol{\Delta}x_j+\frac{\mathrm{i}\hbar\epsilon}{2m}K(x_j)\right)^2\equiv\left(\boldsymbol{\Delta}x_j^a+\frac{\mathrm{i}\hbar\epsilon}{2m}K^a(x_j)\right)g_{ab}(x_j)\left(\boldsymbol{\Delta}x_j^b+\frac{\mathrm{i}\hbar\epsilon}{2m}K^b(x_j)\right), \qquad (5.45)
\end{aligned}
$$

因此得到

$$
\begin{aligned}
&\langle x_b\mid\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}H^S(\hat{p},\hat{x})(t_b-t_b)\right\}\mid x_a\rangle \\
&=\left(\frac{g(x_b)}{g(x_a)}\right)^{\frac{1}{4}}\lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\epsilon}\right)^{\frac{ND}{2}}\int\prod_1^{N-1}\mathrm{d}^Dx_j\sqrt{g(x_j)} \\
&\quad\times\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_1^N\left[\frac{m}{2\epsilon}\left(\boldsymbol{\Delta}x_j^b+\frac{\mathrm{i}\hbar\epsilon}{2m}K^b(x_j)\right)^2-\epsilon V_T(x_j)\right]\right\}. \qquad (5.46)
\end{aligned}
$$

5.3 路径积分中的坐标变换

在通常微积分中, 为简化微分方程或积分计算, 经常需要变换变量. 在路径积分中变量变换是很复杂的. 在今后的分析讨论中始终坚持这样的原则, 即首先是在笛卡儿坐标系中作变量变换, 然后再变换到所采用的坐标系形式.

由平直空间笛卡儿坐标系出发:

$$H=\frac{1}{2m}p^2+V(y), \tag{5.47}$$

考虑坐标变换 $y=y(x)$, x 为弯曲空间坐标, 弯曲空间诱导度规为

$$\mathrm{d}s^2=(\mathrm{d}y)^2=g_{ab}(x)\mathrm{d}x^a\mathrm{d}x^b,\quad g_{ab}(x)=\frac{\partial \boldsymbol{y}(x)}{\partial x^a}\cdot\frac{\partial \boldsymbol{y}(x)}{\partial x^b}. \tag{5.48}$$

在平直空间笛卡儿坐标系中将时间间隔分区后, 分析短时传播函数

$$\langle y_n,t_n|y_{n-1},t_{n-1}\rangle=\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\epsilon}\right)^{\frac{D}{2}}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{m}{2\epsilon}(y_n-y_{n-1})^2-\frac{\mathrm{i}\epsilon}{\hbar}V(y_n)\right\}. \tag{5.49}$$

以下选末点序 (相当 Q-P 序) 作坐标变换, 并注意弯曲空间中算子序问题, 即

$$\begin{aligned}y^i_{n-1}&=y(x_n-\boldsymbol{\Delta}x_{n-1})^i\\&=y^i_n-\mathrm{e}^i_\mu\boldsymbol{\Delta}x^\mu+\frac{1}{2}\mathrm{e}^i_{\mu,\upsilon}\boldsymbol{\Delta}x^\mu\boldsymbol{\Delta}x^\upsilon-\frac{1}{3!}\mathrm{e}^i_{\mu,\upsilon\lambda}\boldsymbol{\Delta}x^\mu\boldsymbol{\Delta}x^\upsilon\boldsymbol{\Delta}x^\lambda+\cdots,\end{aligned}$$

其中,

$$\mathrm{e}^i_\mu=\frac{\partial y^i}{\partial x^\mu},\quad \mathrm{e}^i_{\mu,\upsilon}=\frac{\partial}{\partial x^\upsilon}\mathrm{e}^i_\mu.$$

为简化, 略去右端变量下标 n, 于是

$$\begin{aligned}&(y_n-y_{n-1})^2\\&=\left(\mathrm{e}^i_\mu\boldsymbol{\Delta}x^\mu-\frac{1}{2}\mathrm{e}^i_{\mu,\upsilon}\boldsymbol{\Delta}x^\mu\boldsymbol{\Delta}x^\upsilon+\frac{1}{6}\mathrm{e}^i_{\mu,\upsilon\lambda}\boldsymbol{\Delta}x^\mu\boldsymbol{\Delta}x^\upsilon\boldsymbol{\Delta}x^\lambda+\cdots\right)^2\\&=\boldsymbol{\Delta}x^\mu\boldsymbol{\Delta}x^\upsilon g_{\mu\upsilon}(x)-\boldsymbol{\Delta}x^\mu\boldsymbol{\Delta}x^\upsilon\boldsymbol{\Delta}x^\lambda\mathrm{e}^i_\mu\mathrm{e}^i_{\upsilon,\lambda}+\\&\quad+\boldsymbol{\Delta}x^\mu\boldsymbol{\Delta}x^\upsilon\boldsymbol{\Delta}x^\lambda\boldsymbol{\Delta}x^\kappa\left(\frac{1}{3}\mathrm{e}^i_\mu\mathrm{e}^i_{\upsilon,\lambda,\kappa}+\frac{1}{4}\mathrm{e}^i_{\mu,\upsilon}\mathrm{e}^i_{\lambda,\kappa}\right)+\cdots,\end{aligned} \tag{5.50}$$

所以,

$$
\begin{aligned}
&\langle y_b, t_b \mid y_a, t_a \rangle \\
&= \lim_{N\to\infty} \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon}\right)^{\frac{ND}{2}} \int \prod_1^{N-1} \mathrm{d}^D \boldsymbol{y}_j \\
&\quad \times \exp\left\{ \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \sum_1^N \left[\frac{m}{2\epsilon}(y_n - y_{n-1})^2 - \epsilon V(y_n) \right] \right\} \\
&= \lim_{N\to\infty} \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon}\right)^{\frac{ND}{2}} \int \prod_1^{N} \mathrm{d}^D x_j \sqrt{g(x_j)} \\
&\quad \times \exp\left\{ \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \sum_1^{N-1} \left[\frac{m}{2\epsilon} \left(\boldsymbol{\Delta} x_n + \frac{\mathrm{i}\hbar\epsilon}{2m} K(x_n) \right)^2 - \epsilon(V(x_n) + \boldsymbol{\Delta} V_s(x_n)) \right] \right\}, \quad (5.51)
\end{aligned}
$$

其中,

$$
K^a(x) = g^{ab}_{,b} - g^{ab}\Gamma_b,
$$

$$
\boldsymbol{\Delta} V_s(x) = \frac{\hbar^2}{2m}(g^{ab}_{,a}\Gamma_b + g^{ab}\Gamma_{a,b}) = \frac{\hbar^2}{2m}\partial_a(g^{ab}\Gamma_b). \quad (5.52)
$$

这里已将 (5.50) 式代入了 (5.51) 式. 事实上 (5.50) 式右方第二项系数为

$$
-\mathrm{e}^i_\mu \mathrm{e}^i_{\upsilon,\lambda} = -\Gamma_{\lambda\nu\mu}, \quad (5.53)
$$

第三项系数为

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{3}\mathrm{c}^i_\mu \mathrm{e}^i_{\upsilon,\lambda k} &= \frac{1}{3} g_{\mu\tau} [\partial_k(\mathrm{e}^\tau_i \mathrm{e}^i_{\upsilon,\lambda} - \mathrm{e}^{i\sigma}\mathrm{e}^i_{\upsilon,\lambda}\mathrm{e}^i_\sigma \mathrm{e}^{j\tau}_{,k})] \\
&= \frac{1}{3} g_{\mu\tau}(\partial_k \Gamma^\tau_{\lambda\nu} + \Gamma^\sigma_{\lambda\nu}\Gamma^\tau_{k\sigma}), \quad (5.54)
\end{aligned}
$$

第四项系数为

$$
\frac{1}{4}\mathrm{e}_{i\mu,\nu}\mathrm{c}^i_{\lambda,k} = \frac{1}{4}\mathrm{e}^\sigma_i \mathrm{c}^i_{\mu,\nu}\mathrm{e}_{j\sigma}\mathrm{c}^j_{\lambda,k} = \frac{1}{4}\Gamma^\sigma_{\mu\nu}\Gamma_{\lambda k\sigma}.
$$

因此 (5.50) 式可表示为

$$
\begin{aligned}
(\boldsymbol{\Delta} y)^2 &= (\boldsymbol{\Delta} x)^2 - \Gamma_{\lambda\nu\mu}\boldsymbol{\Delta} x^\lambda \boldsymbol{\Delta} x^\nu \boldsymbol{\Delta} x^\mu \\
&\quad + \left[\frac{1}{3} g_{\mu\tau}(\partial_\mu \Gamma^\tau_{\lambda\nu} + \Gamma^\sigma_{\lambda\nu}\Gamma^\tau_{k\sigma}) + \frac{1}{4}\Gamma^\sigma_{\mu\nu}\Gamma_{\lambda k\sigma} \right] \boldsymbol{\Delta} x^\mu \boldsymbol{\Delta} x^\nu \boldsymbol{\Delta} x^\lambda \boldsymbol{\Delta} x^k + \cdots \\
&= (\boldsymbol{\Delta} x)^2 - \Gamma_{\lambda\nu\mu}\boldsymbol{\Delta} x^\lambda \boldsymbol{\Delta} x^\nu \boldsymbol{\Delta} x^\mu + \left(\frac{1}{6} g_{\mu\nu,\lambda k} - \frac{1}{12}\Gamma^\sigma_{\mu\nu}\Gamma_{\lambda k\sigma} \right) \\
&\quad \times \boldsymbol{\Delta} x^\mu \boldsymbol{\Delta} x^\nu \boldsymbol{\Delta} x^\lambda \boldsymbol{\Delta} x^k + \cdots. \quad (5.55)
\end{aligned}
$$

将以上结果代入 (5.51) 式, 注意到高斯积分且准确到 $O(\epsilon^2)$, 即得上述结果.

以 $d=1$ 维情况为例, 有

$$y=y(x),\quad \mathrm{d}y=y'\mathrm{d}x,\quad g_{ab}=(y')^2=g(x), \tag{5.56}$$

$$\boldsymbol{\Delta}y=y(x)-y(x-\boldsymbol{\Delta}x)=y'\boldsymbol{\Delta}x-\frac{1}{2}(y''(\boldsymbol{\Delta}x))^2+\frac{1}{6}y^{(3)}(\boldsymbol{\Delta}x)^3, \tag{5.57}$$

$$(\boldsymbol{\Delta}y)^2=(y')^2(\boldsymbol{\Delta}x)^2-y'y''(\boldsymbol{\Delta}x)^3+\left(\frac{1}{3}y'y^{(3)}+\frac{1}{4}(y'')^2\right)(\boldsymbol{\Delta}x)^4, \tag{5.58}$$

易推导

$$K=-3\frac{y''}{(y')^2}, \tag{5.59}$$

$$\boldsymbol{\Delta}V_s=\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{y'''}{(y')^3}-3\frac{(y'')^2}{(y')^4}\right]. \tag{5.60}$$

5.4 路径积分中的时间变换 —— 推进子的路径积分表示

推进子的引入 费恩曼传播函数

$$\begin{aligned}K(x_b,t_b;x_a,t_a)&=\int_{x_a}^{x_b}\mathrm{D}x(t)\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}tL(x(t),\dot{x}(t),t)\right\}\\&=\left[\det\left(\frac{\mathrm{i}}{2\pi\hbar}\frac{\partial^2 S_{cl}}{\partial x_b^j\partial x_a^k}\right)\right]^{\frac{1}{2}}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S_{cl}(x_b,t_b;x_a,t_a)\right\}\end{aligned} \tag{5.61}$$

满足依赖时间的薛定谔方程, 即

$$\left[\hat{H}(\boldsymbol{x},-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{\nabla})-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right]\Psi(\boldsymbol{x},t)=0. \tag{5.62}$$

而此方程的格林函数为

$$G(x_b,t_b;x_a,t_a)=\Theta(t_b-t_a)K(x_b,t_b;x_a,t_a). \tag{5.63}$$

对于定态问题, $\hat{H}$ 不显含时间, 可令 $\Psi(\boldsymbol{x},t)=\psi(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}$, 得定态薛定谔方程

$$[\hat{H}(\boldsymbol{x},-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{\nabla})-E]\psi(\boldsymbol{x})=0. \tag{5.64}$$

相应地, 其能量空间格林函数 $\mathcal{G}(x_b,x_a;E)$ 为 $G(x_b,t;x_a,t_a)$ 的傅里叶变换

$$\begin{aligned}\mathcal{G}(x_b,x_a;E)&=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^\infty\mathrm{d}tK(x_b,t;x_a,0)\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et\right\}\\&=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^\infty\mathrm{d}t\langle x_b\mid\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\hat{H}-E)t\right\}\mid x_a\rangle\\&=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^\infty\mathrm{d}T\int_{x(0)=x_a}^{x(T)=x_b}\mathrm{D}x(t)\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^T\mathrm{d}t\left(\frac{m}{2}\dot{x}^2-V(x)+E\right)\right\}.\end{aligned} \tag{5.65}$$

这相当于将指数上经典作用量

$$S(T)=\int_0^T \mathrm{d}t\left(\frac{m}{2}\dot{x}^2-V(x)\right) \tag{5.66}$$

换为给定能量 E 的约化作用量

$$W(E)=S(T)+ET=\int_0^T \mathrm{d}t\left(\frac{m}{2}\dot{x}^2-V(x)+E\right). \tag{5.67}$$

这样得到的路径积分称为推进子 (promotor), 记为

$$\begin{aligned}P(x_b,x_a;T)&=K(x_b,x_a;T)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}ET}\\&=\int_{x(0)=x_a}^{x(T)=x_b}\mathrm{D}x(t)\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^T\mathrm{d}t\left(\frac{m}{2}\dot{x}^2-V(x)+E\right)\right\},\end{aligned} \tag{5.68}$$

或

$$P(x_b,x_a;T)=\langle x_b\mid\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\hat{H}-E)T\right\}\mid x_a\rangle. \tag{5.69}$$

此时能量空间格林函数是推进子对时间的积分

$$\mathcal{G}(x_b,x_a;E)=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^\infty \mathrm{d}tP(x_b,x_a;t)=\langle x_b\mid(E-\hat{H})^{-1}\mid x_a\rangle \tag{5.70}$$

时间变换　推进子的引入, 相当于增加了一新量纲 (new dimension) 或者说体系具有了一个新的泛函自由度, 这就使得路径积分中的时间变换更加方便. 例如, 当作时间变换时格林函数不变, 即

$$\mathcal{G}(x_b,x_a;E)=\int_0^\infty \mathrm{d}sP(x_b,x_a;s),$$

其中,

$$P(x_b,x_a;s)=P(x_b,x_a;t)\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}s}.$$

因此利用推进子可在路径积分中进行时间变换.

费恩曼传播函数是能量空间格林函数的逆傅里叶变换:

$$K(x_b,t_b;x_a,t_a)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}E}{2\pi\hbar}\mathcal{G}(x_b,x_a;E)\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E(t_b-t_a)\right\}, \tag{5.71}$$

为了使得积分收敛, 通常需添加一个无穷小量将能量移动到上半平面, $E\to E+\mathrm{i}0^+$.

所以能量空间格林函数为

$$
\begin{aligned}
\mathcal{G}(x_b,x_a;E) &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^\infty \mathrm{d}s\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Es\right\}\langle x_b\mid\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}s\right\}\mid x_a\rangle \\
&= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^\infty \mathrm{d}s\langle x_b\mid\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}s}{\hbar}(\hat{H}-E-\mathrm{i}0^+)\right\}\mid x_a\rangle \\
&= \langle x_b\mid\frac{1}{E-\hat{H}+\mathrm{i}0^+}\mid x_a\rangle \equiv \langle x_b\mid\hat{R}\mid x_a\rangle \\
&= \sum_n \frac{1}{E-E_n+\mathrm{i}0^+}\psi_n(x_b)\psi_n^*(x_a).
\end{aligned}
\tag{5.72}
$$

因此当找到 (5.72) 式中格林函数的极点与割线, 便可获得体系的全部能谱及本征函数.

(5.72) 式中的算子

$$
\hat{R} = \frac{1}{E-\hat{H}+\mathrm{i}0^+}
$$

称为格林函数的预解 (resolvent) 算子, 在路径积分下作时间变换, 相当于对预解算子 $\hat{R}$ 作变换

$$
\hat{R} = \frac{1}{E-\hat{H}+\mathrm{i}0^+} = \hat{f}_r\frac{1}{\hat{f}_l(E-\hat{H}+\mathrm{i}0^+)\hat{f}_r}\hat{f}_l,
\tag{5.73}
$$

其中, $\hat{f}_l$, $\hat{f}_r$ 为依赖 $\hat{x},\hat{p}$ 的变换算子, 称正则化函数算子, 下面为简化讨论, 假定它们仅依赖坐标, 这时

$$
\begin{aligned}
&\mathcal{G}(x_b,x_a;E) \\
&= f_r(x_b)f_l(x_a)\langle x_b\mid\frac{1}{\hat{f}_l(\hat{x})(E-\hat{H}+\mathrm{i}0^+)\hat{f}_r(\hat{x})}\mid x_a\rangle \\
&= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}f_r(x_b)f_l(x_a)\int_0^\infty \mathrm{d}s\langle x_b\mid\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}s}{\hbar}\hat{f}_l(\hat{x})(\hat{H}-E-\mathrm{i}0^+)\hat{f}_r(\hat{x})\right\}\mid x_a\rangle.
\end{aligned}
\tag{5.74}
$$

路径积分中的时间变换就是选择正则化函数 f_l 和 f_r, 使得新哈密顿量 (称为辅助哈密顿量 auxiliary Hamiltion)

$$
-\hat{H}_E = \hat{f}_l(\hat{x})(E-\hat{H}+\mathrm{i}0^+)\hat{f}_r(\hat{x})
\tag{5.75}
$$

可用路径积分方式精确可解

$$
\mathcal{G}(x_b,x_a;E) = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{s_a}^\infty \mathrm{d}s\langle x_b\mid\hat{u}_E(s_b-s_a)\mid x_a\rangle,
$$

其中

$$
\begin{aligned}
\hat{u}_E(s) &= \hat{f}_r(\hat{x})\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}s}{\hbar}\hat{f}_l(\hat{x})(\hat{H}-\hat{E})\hat{f}_r(\hat{x})\right\}\hat{f}_l(\hat{x}) \\
&= \hat{f}_r(\hat{x})\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}s}{\hbar}\hat{H}_E\right\}\hat{f}_l(\hat{x}).
\end{aligned}
\tag{5.76}
$$

在一般情况下辅助哈密顿量 $\hat{H}_E$ 非厄米, 故 $\hat{u}_E(s)$ 一般非幺正, 称为赝时 (pseudo-time) 演化算子.

现在来看在时间变换下 $\hat{H}_E$ 的短时间传播函数, 将 s 变量分成 N 个间隔,

$$\begin{aligned}\langle x_j \mid \exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\epsilon\hat{H}_E\right\} \mid x_{j-1}\rangle &= \langle x_j \mid \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\epsilon f_l(\hat{x})(E-\hat{H}+\mathrm{i}0^+)f_r(\hat{x})\right\} \mid x_{j-1}\rangle \\ &= \times\int\frac{\mathrm{d}^D\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^D}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[p\boldsymbol{\Delta}x_j+\epsilon f_l(\hat{x}_j)\right.\right. \\ &\quad \left.\left.\times(E-H(p,x_j))f_r(x_{j-1})\right]\right\},\end{aligned} \tag{5.77}$$

其中,

$$\boldsymbol{\Delta}x_j = x_j - x_{j-1}, \quad \epsilon = \frac{s}{N}.$$

因此, 经过时间变量变换后的传播函数为

$$\begin{aligned}&\langle x_b \mid \exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}sH_E\right\} \mid x_a\rangle \\ &= \lim_{N\to\infty}\int\prod_1^{N-1}\mathrm{d}^Dx_j\prod_1^N\frac{\mathrm{d}^Dp_s}{(2\pi\hbar)^D} \\ &\quad\times\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_1^N\left[p_j\boldsymbol{\Delta}x_j+\epsilon\hat{f}_l(\hat{x_j})(E-H(p_j,x_j))\hat{f}_r(x_{j-1})\right]\right\} \\ &= \lim_{N\to\infty}\int\prod_1^{N-1}\mathrm{d}x_j\prod_1^N\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\epsilon f_l(x_j)f_r(x_{j-1})}\right)^{\frac{D}{2}} \\ &\quad\times\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_1^N\left[\frac{m}{2f_l(x_j)f_r(x_{j-1})}\frac{(x_j-x_{j-1})^2}{\epsilon}\right.\right. \\ &\quad\left.\left.+\epsilon f_l(x_j)(E-V(x_j))f_r(x_{j-1})\right]\right\}.\end{aligned} \tag{5.78}$$

解量子力学体系, 即求体系能谱及相应本征函数. 当找到费恩曼传播函数 $K(x_b,t_b;x_a,t_a)$ 或能量空间格林函数 $\mathcal{G}(x_b,x_a;E)$, 二者给出相同信息. 而后者还可记为推进子的时间积分: $\mathcal{G}(x_b,x_a;E)=\int_0^{\infty}\mathrm{d}sP(x_b,x_a;s)$. 由上面表达式看出, 在时间变换下动能项一般变为非标准高斯型, 因此还需要进一步通过坐标变换使其变成标准高斯型. 在后面两节中, 将通过具体例子并采用路径积分末点描写来作详细分析.

5.5 库仑体系的路径积分, 二维"氢原子"问题

作为时间变换和坐标变换的简单应用举例, 本节中将具体讨论含有库仑作用的电子–质子体系, 并且应用到二维"氢原子" 问题.

两体库仑体系 设粒子质量为 m_e, m_p , 约化质量 $M = \dfrac{m_e m_p}{m_e + m_p}$, 电子电荷为 e, 则哈密顿量为

$$H = \frac{p^2}{2M} - \frac{e^2}{r}. \tag{5.79}$$

此体系的费恩曼传播函数可形式地表示为

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \int D^3x(t) \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_b}^{t_a} \mathrm{d}t(p\dot{x} - H)\right\}. \tag{5.80}$$

进行具体计算时, 由于势在原点奇异, 直接对短时间传播函数计算有困难, 需设法正则化, 相当于上节中作时间变换, 将其变换到赝时间 s. 首先选取正则化函数满足

$$f_l(x)f_r(x) \equiv f(x) = r, \tag{5.81}$$

使得辅助哈密顿量 H_E 在原点不奇异, 然后再对赝时间 s 取短时间传播函数计算. 为此令

$$f_l(x) = f(x)^{1-\lambda}, \quad f_r(x) = f(x)^{\lambda}, \tag{5.82}$$

并要求在取连续极限时所得结果与分裂参数 λ 无关. 这里引入分裂参数 λ 也是作为计算过程中的初步检验.

下面计算推进子:

$$\begin{aligned}
\langle x_b|\hat{u}_E(s)|x_a\rangle =& r_b^{\lambda} r_a^{(1-\lambda)} \int D^3x(s) \int \frac{D^3p(s)}{(2\pi\hbar)^3} \\
&\times \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^s \mathrm{d}s\left[p\dot{x} - r^{(1-\lambda)}(H-E)r^{\lambda}\right]\right\} \\
\approx& r_b^{\lambda} r_a^{1-\lambda} \int \prod_1^{N-1} \mathrm{d}^3x_j \prod_1^{N} \frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi\hbar)^3} \\
&\times \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_1^N \left[p_j \boldsymbol{\Delta} x_j - \epsilon r_j^{1-\lambda} r_{j-1}^{\lambda}\left(\frac{p_j^2}{2m} - E\right) + \epsilon e^2\right]\right\}.
\end{aligned} \tag{5.83}$$

上式中, 最后一步取近似是因为在最后一项中最初含有因子 $\left(\dfrac{r_{j-1}}{r_j}\right)^{\lambda}$, 它在取连续

极限时趋于 1. (5.83) 式对动量积分后, 得

$$\begin{aligned}&\langle x_b \mid \hat{u}_E(s) \mid x_a\rangle\\&=\frac{r_b^{\lambda} r_a^{1-\lambda}}{\sqrt{(2\pi\mathrm{i}\epsilon\hbar r_b^{(1-\lambda)} r_a^{\lambda}/M)^D}}\int\prod_1^{N-1}\frac{\mathrm{d}^D x_j}{\sqrt{(2\pi\mathrm{i}\epsilon\hbar r_{j-1}/M)^D}}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}A_E\right\},\end{aligned}\tag{5.84}$$

其中,

$$A_E=N\epsilon e^2+\sum_1^N\left[\frac{M}{2}\frac{(\boldsymbol{\Delta} x_j)^2}{\epsilon r_j^{1-\lambda} r_{j-1}^{\lambda}}+\epsilon r_j E\right].\tag{5.85}$$

因为在取连续极限时 $r_j^{1-\lambda} r_{j-1}^{\lambda} \to r_j$, 故 (5.85) 式可以表示为

$$A_E=e^2 S+\int_0^S \mathrm{d}s\left(\frac{M}{2r}\dot{x}^2+E\cdot r\right).\tag{5.86}$$

注意, 赝动能项的量纲 $[rp^2]\backsim[r^{-1}]$, 恰与势能项的量纲 $[r^{+1}]$ 相反, 而这点与谐振子的情况相似: 动能项的量纲 $[p^2]=[r^{-2}]$, 与势能项的量纲 $[r^2]$ 正好相反. 这就提示我们可以设法通过变换 $r\to u^2$, 使问题变为谐振子形式, 从而可将具体问题进行求解.

二维"氢原子" 下面以二维"氢原子"问题为例进行计算.

将二维的坐标系拓展成二维复平面, 即将二维矢量 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{u}$ 看成二维复平面上的矢量. 引入变换 $\boldsymbol{u}=\sqrt{\boldsymbol{x}}$, 即 $x_1+\mathrm{i}x_2=(u_1+\mathrm{i}u_2)^2$

$$\begin{aligned}x_1&=u_1^2-u_2^2,\\x_2&=2u_1u_2.\\r&=\sqrt{x_1^2+x_2^2}=u_1^2+u_2^2\end{aligned}$$

写成矩阵形式为

$$\begin{pmatrix}x_1\\x_2\end{pmatrix}=\boldsymbol{A}(\boldsymbol{u})\begin{pmatrix}u_1\\u_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}u_1&-u_2\\u_2&u_1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}u_1\\u_2\end{pmatrix}$$

而且

$$\begin{pmatrix}\mathrm{d}x_1\\\mathrm{d}x_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}2u_1&-2u_2\\2u_2&2u_1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\mathrm{d}u_1\\\mathrm{d}u_2\end{pmatrix}=2\boldsymbol{A}(\boldsymbol{u})\begin{pmatrix}\mathrm{d}u_1\\\mathrm{d}u_2\end{pmatrix}.\tag{5.87}$$

于是度规可表示为

$$\begin{aligned}\mathrm{d}s^2&=\mathrm{d}x_1^2+\mathrm{d}x_2^2=4(u_1^2+u_2^2)(\mathrm{d}u_1^2+\mathrm{d}u_2^2),\\\boldsymbol{g}_{ab}&=4(u_1^2+u_2^2)\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix},\end{aligned}$$

和

$$g = \det(g_{ab}) = [4(u_1^2 + u_2^2)]^2 = 16(x_1^2 + x_2^2) = 16r^2 \ . \tag{5.88}$$

实际上, 变换 (5.87) 式是平直空间 → 平直空间上的共形变换. 在此变换下 (注意 $f(x) = r$), 有

$$\begin{aligned} A_E &= e^2 S + \int_0^S \mathrm{d}s \left(\frac{4M}{2} \dot{\boldsymbol{u}}^2 + E\boldsymbol{u}^2 \right) \\ &= e^2 S + \int_0^S \mathrm{d}s \frac{\mu}{2} (\dot{\boldsymbol{u}}^2 - \omega^2 \boldsymbol{u}^2), \end{aligned} \tag{5.89}$$

其中,

$$\mu = 4M, \quad \omega = \sqrt{\frac{-E}{2M}}.$$

(5.89) 式表明, 经过变换后已将辅助哈密顿量变成了谐振子的形式, 因而可以严格求解, 进而说明二维"氢原子"问题可以严格求解.

当库仑体系能量为负时, 还需要对束缚态进行计算, 由于

$$\langle \boldsymbol{x}_b \mid \hat{u}_E(s) \mid \boldsymbol{x}_a \rangle = \frac{1}{4} \exp \left\{ \frac{\mathrm{i}e^2 S}{\hbar} \right\} [\langle \boldsymbol{u}_b s \mid \boldsymbol{u}_a 0 \rangle + \langle -\boldsymbol{u}_b s \mid \boldsymbol{u}_a 0 \rangle], \tag{5.90}$$

其中,

$$\langle \boldsymbol{u}_b s \mid \boldsymbol{u}_a 0 \rangle = \frac{\mu\omega}{2\pi i\hbar \sin\omega s} \exp \left\{ \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \frac{m\omega}{\sin\omega s} [(\boldsymbol{u}_a^2 + \boldsymbol{u}_b^2)\cos\omega s - 2\boldsymbol{u}_b\boldsymbol{u}_a] \right\} \tag{5.91}$$

而

$$\mathcal{G}(\boldsymbol{x}_b, \boldsymbol{x}_a; E) = \int_0^\infty \mathrm{d}s \frac{1}{4} [\langle \boldsymbol{u}_b s \mid \boldsymbol{u}_a 0 \rangle + \langle -\boldsymbol{u}_b s \mid \boldsymbol{u}_a 0 \rangle] \exp \left\{ \frac{\mathrm{i}e^2 S}{\hbar} \right\}. \tag{5.92}$$

最后由格林函数可求出体系的能谱及相应的本征波函数. 需要指出 (5.92) 式右端两

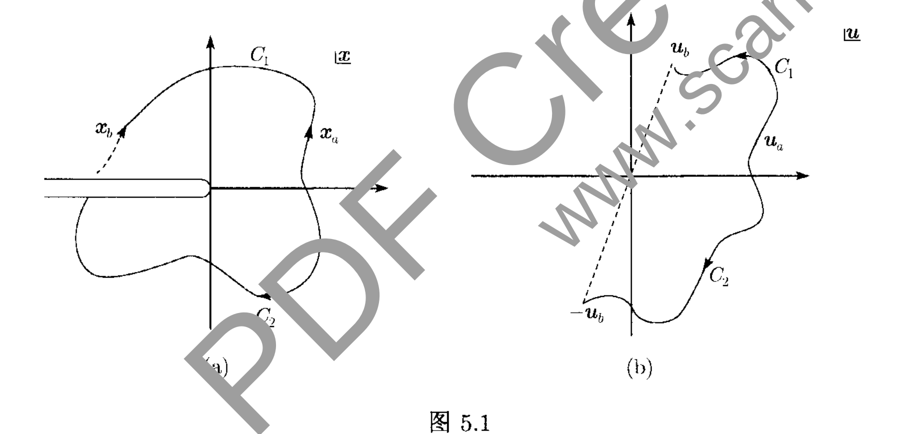


图 5.1

项是由于方根映射造成符号不确定性. 当考虑在复平面 $x = x_1 + \mathrm{i}x_2$, 由 x_a 到 x_b 将映射到复平面 U 上两条不同路径. 如图 5.1(a)、图 5.1(b) 所示: 路径 C_1 是由 x_a 直接到 x_b, $r_b = u_b^2$; 路径 C_2 是由 x_a 到第二叶的 x_b. $r_b = (-u_b)^2$.

5.6　三维库仑势, 氢原子问题

氢原子的传播函数　本节的主旨是要说明, 三维库仑势问题在路径积分理论中可以严格求解. 为简单起见, 这里只讨论氢原子问题①. 氢原子体系的费恩曼传播函数为

$$K(x_b, x_a, T) = \int_{x(0)=x_a}^{x(T)=x_b} \mathrm{D}^3 x \frac{\mathrm{D}^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^T \mathrm{d}t \left(p\dot{x} - \frac{p^2}{2m} + \frac{e^2}{r}\right)\right\}. \tag{5.93}$$

首先作时间变换, 用库仑势对时间的积分作为新时间变量, 即

$$s(t) = \int^t \frac{\mathrm{d}\tau}{r(\tau)}, \quad \frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{r(t)},$$

则费恩曼传播函数被改写为

$$\begin{aligned} &K(x_b, x_a, T) \\ &= \int_{x_a}^{x_b} \mathrm{D}^3 x \frac{\mathrm{D}^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^{s_b} \mathrm{d}s \left(p(s)x'(s) - r(s)\frac{p^2(s)}{2m} + e^2\right)\right\}, \end{aligned} \tag{5.94}$$

其中, 撇号 $' \equiv \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}$ 表示导数. 注意, (5.94) 式右端 $s(t)$ 作为独立变量还应受到约束, 使得 $T = \int_0^{s_b} \mathrm{d}s r(s)$. 在运算中可利用 δ 函数来实现此约束:

$$\begin{aligned} K(x_b, x_a, T) = &\int_0^\infty \mathrm{d}s_b \delta\left(T - \int_0^{s_b} \mathrm{d}s r(s)\right) \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}e^2 s_b\right\} \\ &\times r_b \int_{x_a}^{x_b} \mathrm{D}^3 x \frac{\mathrm{D}^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^{s_b} \mathrm{d}s \left(px' - \frac{rp^2}{2m}\right)\right\} \\ = &\int_0^\infty \mathrm{d}s_b \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}E}{2\pi\hbar} \exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E\left(T - \int_0^{s_b} \mathrm{d}s r(s)\right)\right\} \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}e^2 s_b\right\} \\ &\times r_b \int_{x_a}^{x_b} \mathrm{D}^3 x \frac{\mathrm{D}^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^{s_b} \mathrm{d}s \left(px' - \frac{rp^2}{2m}\right)\right\} \\ = &\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}E}{2\pi\hbar} \exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}ET\right\} \mathcal{G}(x_b, x_a; E), \end{aligned} \tag{5.95}$$

① Duru I H, Kleinert H. 1979. Phys.Lett.B, 84 (2): 185.

其中, 格林函数

$$
\begin{aligned}
\mathcal{G}(x_b, x_a, E) &= \int_0^\infty \mathrm{d}s_b \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} e^2 s_b\right\} r_b \int_{x_a}^{x_b} \mathrm{D}^3 x \frac{\mathrm{D}^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \\
&\quad \times \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^{s_b} \mathrm{d}s\left(px' - \frac{rp^2}{2m} + Er\right)\right\} \\
&\equiv \int_0^\infty \mathrm{d}\tau \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} e^2 \tau\right\} P(x_b, x_a, \tau), \qquad (5.96)
\end{aligned}
$$

而推进子的路径积分表示为

$$
P(x_b, x_a, \tau) = r_b \int_{x_a}^{x_b} \mathrm{D}^3 x \frac{\mathrm{D}^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^\tau \mathrm{d}s\left(px' - \frac{rp^2}{2m} + Er\right)\right\}. \qquad (5.97)
$$

***K-S* 变换** 下面利用 K-S 变换 (Kustaanheimo-Stiefel) 设法将其转变为谐振子型积分. 在 5.5 节, 二维库仑势用复方根变换, 现在对氢原子问题应作推广, 实际上相当于作 "四元数方根 "变换, 即令

$$
\boldsymbol{x}^i = \bar{\boldsymbol{z}}\boldsymbol{\sigma}^i\boldsymbol{z}, \quad r = \bar{\boldsymbol{z}}\boldsymbol{z}, \qquad (5.98)
$$

其中, $\boldsymbol{\sigma}^i$ 为三个泡利矩阵. (5.98) 式中的坐标

$$
\boldsymbol{z} = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix}, \quad \bar{\boldsymbol{z}} = \begin{pmatrix} z_1^* & z_2^* \end{pmatrix}, \qquad (5.99)
$$

其中,

$$
z_1 = u_1 + \mathrm{i}u_2 = \sqrt{r}\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}(\varphi+\gamma)}, \qquad (5.100)
$$

$$
z_2 = u_3 + \mathrm{i}u_4 = \sqrt{r}\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}(\varphi-\gamma)}. \qquad (5.101)
$$

其中, r、θ、φ 为三维球坐标, 另外, 多一个自由度 γ $(0 \leqslant \gamma < 4\pi)$

利用"四元数方根"变换, 可将三维欧氏空间嵌入在四维 u 空间:

$$
\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_3 & u_4 & u_1 & u_2 \\ u_4 & -u_3 & -u_2 & u_1 \\ u_1 & u_2 & -u_3 & -u_4 \\ u_2 & -u_1 & u_4 & -u_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix}, \qquad (5.102)
$$

即

$$
x_i = \sum_j A_{ij} u_j, \quad r = u_1^2 + u_2^2 + u_3^2 + u_4^2 \equiv \boldsymbol{u}^2. \qquad (5.103)
$$

易证

$$\mathrm{d}\boldsymbol{x} = 2A(\boldsymbol{u})\,\mathrm{d}\boldsymbol{u}. \tag{5.104}$$

注意, 虽然 $x_4 = 0$, 但 $\mathrm{d}x_4 \neq 0$, 而是

$$\mathrm{d}x_4 = 2\left(u_2\mathrm{d}u_1 - u_1\mathrm{d}u_2 + u_4\mathrm{d}u_3 - u_3\mathrm{d}u_4\right) = r\left(\cos\theta\mathrm{d}\varphi + \mathrm{d}\gamma\right), \tag{5.105}$$

因此第四分量也会进入路径积分中. 这样作用量的动能部分 A_{Kin} 为

$$A_{Kin} = \sum_1^N \frac{M}{2}\frac{\left(\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{x}_{n-1}\right)^2}{\epsilon r_n^{1-\lambda} r_{n-1}^{\lambda}}. \tag{5.106}$$

氢原子的推进子 将推进子 ((5.97) 式) 对动量积分后, 再插入下面等式:

$$\prod_1^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}\left(\boldsymbol{\Delta}x^4\right)_{n-1}}{\sqrt{(2\pi\mathrm{i}\hbar)\,\epsilon r_n^{1-\lambda} r_{n-1}^{\lambda}/M}}\right] \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_1^N \frac{M}{2}\frac{\left(\boldsymbol{\Delta}x_n^4\right)^2}{\epsilon r_n^{1-\lambda} r_{n-1}^{\lambda}}\right\} = 1, \tag{5.107}$$

便可将路径积分推广到四维空间而不改变振幅, 而且注意原坐标分量积分仅有 $N-1$ 重, 此外再将第四分量积分扩展到包含最初间隔 x_0^4, 最后得

$$P\left(x_b, x_a, \tau\right) = \frac{1}{\left(\dfrac{2\pi\mathrm{i}\hbar\epsilon}{M}\right)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}x_a^4}{r_a} \prod_1^N \left[\frac{\mathrm{d}^4\boldsymbol{\Delta x}_n}{\left(\dfrac{2\pi\mathrm{i}\hbar\epsilon r_n^2}{M}\right)^2}\right] \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(A_E + A_f\right)\right\}, \tag{5.108}$$

其中

$$A_E = \sum_1^N \left[\frac{M}{2}\frac{\left(\boldsymbol{\Delta x}_n\right)^2}{\epsilon r_n^{1-\lambda} r_{n-1}^{\lambda}} + \epsilon r_n^{1-\lambda} r_{n-1}^{\lambda} E\right] \tag{5.109}$$

而 (5.108) 式中的 A_f 与剩余的前置因子

$$\left(\frac{r_b}{r_a}\right)^{3\lambda-2} = \prod_1^N \left(\frac{r_n}{r_{n-1}}\right)^{3\lambda-2} \tag{5.110}$$

相关, 可以证明

$$\frac{\mathrm{i}}{\hbar}A_f = 3\lambda\sum_1^N \ln\left(\frac{\boldsymbol{u}_n^2}{\boldsymbol{u}_{n-1}^2}\right). \tag{5.111}$$

为简单起见, 取 $\lambda = 0$ 得

$$P\left(x_b, x_a, \tau\right) = \frac{1}{16}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}x_a^4}{r_a} K\left(\boldsymbol{u}_b, \boldsymbol{u}_a, \tau\right), \tag{5.112}$$

而

$$
\begin{aligned}
& K\left(\boldsymbol{u}_b, \boldsymbol{u}_a, \tau\right) \\
= & \int_{u_a}^{u_b} D^4 u(s) \exp \left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \int_0^\tau \mathrm{d} s \frac{\mu}{2}\left(\boldsymbol{u}^{\prime 2}-\omega^2 \boldsymbol{u}^2\right)\right\} \\
= & \left(\frac{\mu \omega}{2 \pi \mathrm{i} \hbar \sin \omega \tau}\right)^2 \exp \left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \frac{\mu \omega}{2 \sin \omega \tau}\left[\left(\boldsymbol{u}_b^2+\boldsymbol{u}_a^2\right) \cos \omega \tau-2 \boldsymbol{u}_b \boldsymbol{u}_a\right]\right\}, \qquad (5.113)
\end{aligned}
$$

其中,

$$
\mu=4 M, \quad \omega=\sqrt{-\frac{E}{2 M}}.
$$

若将 (5.112) 式中对 $\mathrm{d}x_a^4$ 的积分化为对 γ_a 的积分, 得

$$
\mathcal{G}\left(x_b, x_a, E\right)=\int_0^{\infty} \mathrm{d} \tau \exp \left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} e^2 \tau\right\} \frac{1}{16} \int_0^{4 \pi} \mathrm{d} \gamma_a K\left(\boldsymbol{u}_b, \boldsymbol{u}_a, \tau\right). \qquad (5.114)
$$

利用格林函数可求氢原子中束缚态能谱及波函数. 格林函数的明显推导要求繁琐计算, 这里仅列出其结果[①]:

$$
\mathcal{G}(x_b, x_a; E)=\frac{1}{4\pi}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\gamma)\mathcal{G}_l(r_b, r_a; E),
$$

其中径向格林函数为

$$
\begin{aligned}
& \mathcal{G}_l(r_b, r_a; E) \\
= & \frac{2m\omega}{\hbar\sqrt{r_b r_a}}\int_0^{\infty}\frac{\mathrm{d}\tau}{\sin\omega\tau}\exp\left\{\frac{4\mathrm{i}e^2\tau}{\hbar}-\frac{m\omega}{2\mathrm{i}\hbar}(r_b+r_a)\cot(\omega\tau)\right\} I_{2l+1}\left(\frac{m\omega\sqrt{r_b r_a}}{\mathrm{i}\hbar\sin\omega\tau}\right) \\
= & \frac{1}{r_b r_a}\sqrt{\frac{m}{-2E}}\frac{1}{(2l+1)!}\Gamma\left(1+l+\frac{\mathrm{i}e^2}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{2E}}\right) W_{\nu, l+\frac{1}{2}}\left(\sqrt{\frac{-8mE}{\hbar^2}}\max(r_b, r_a)\right) \\
& \times M_{\nu, l+\frac{1}{2}}\left(\sqrt{\frac{-8mE}{\hbar^2}}\min(r_b, r_a)\right), \quad \nu=\frac{e^2}{\hbar}\sqrt{\frac{-m}{2E}},
\end{aligned}
$$

$W_{\nu,l+\frac{1}{2}}(z), M_{\nu,l+\frac{1}{2}}(z)$ 为惠特克 (Whittaker) 函数[②]. 由 Γ 函数的极点位置

$$
1+l+\frac{\mathrm{i}e^2}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{2E}}=-n_r=0,-1,-2,\cdots
$$

可得束缚态能级

$$
E_n=-\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2}, \quad n=n_r+l+1=1,2,3,\cdots.
$$

① Chaichian M, Demichev A. 2001. Path Integral in Physics. Institute of Physics Publishing Bristol and Philadelphia.

② 王竹溪, 郭敦仁. 2000. 特殊函数概论. 北京：北京大学出版社, 331.

此即通常量子力学得到的氢原子能谱, 到此已基本说明了氢原子问题可用路径积分严格求解.

习　题　5

1. 请证明当采用 Weyl 序 (点阵中点描写)

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\Delta}_{LB} &= -\frac{1}{\sqrt{g}}\partial_a(\sqrt{g}g^{ab}\partial_b)\\ &= \frac{1}{8m}[g^{ab}p_ap_b + 2p_ag^{ab}p_b + p_ap_bg^{ab}] + \boldsymbol{\Delta}V_W(x),\end{aligned}$$

其中, $\boldsymbol{\Delta}V_W = \dfrac{\hbar^2}{8m}(g^{ab}\Gamma^d_{ac}\Gamma^c_{bd} + \mathcal{R})$, $\mathcal{R}$ 为标曲率.

2. 请证明当采用 Q-P 序 (标准序)(点阵末点描写)

$$\begin{aligned}H &= -\frac{1}{\sqrt{g}}\partial_a(\sqrt{g}g^{ab}\partial_b)\\ &= \frac{1}{2m}(g^{ab}\hat{p}_a\hat{p}_b - \mathrm{i}\hbar K^a\hat{p}_a) + \boldsymbol{\Delta}V_s(x),\end{aligned}$$

其中, $K^a(x) = g^{ab}_{,b} - g^{ab}\Gamma_b$, $\boldsymbol{\Delta}V_s = \dfrac{\hbar^2}{2m}\partial_a(g^{ab}\Gamma_b)$, 并以一维哈密顿体系 $H = \dfrac{p^2}{2m} + V(y)$ 为例, 通过坐标变换 $y = y(x)$, 用末点描写得

$$K = -3\frac{y''}{(y')^2}, \quad \boldsymbol{\Delta}V_s = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{y'''}{(y')^3} - 3\frac{(y'')^2}{(y')^4}\right).$$

第 6 章　约束体系的路径积分

6.1　经典约束体系动力学

关于力学体系动力学的描述通常有拉格朗日和哈密顿两种形式. 拉格朗日形式是由位形空间独立变量来描述力学体系的运动, 拉格朗日运动方程是二阶常微分方程组. 后来, 哈密顿在 1834 年提出：如果用坐标和动量作为独立变量, 虽然运动方程的数目多了一倍, 但微分方程式却由二阶降为一阶. 这组方程称为哈密顿正则方程. 在一个力学体系中, 常常存在着一些限制质点 (自由) 运动的条件, 这些条件我们称之为约束. 物理体系的运动通常都会受到某些约束条件的限制, 下面从力学体系的拉氏量出发, 来进行详细地讨论.

正则力学体系　经典力学系统拉氏量一般是坐标、速度和时间的函数, 即

$$L = L\left(q^i(t), \dot{q}^i(t), t\right), \tag{6.1}$$

其作用量可写为

$$S[q(t)] = \int \mathrm{d}t L\left(q^i\left(t\right), \dot{q}^i\left(t\right), t\right). \tag{6.2}$$

根据最小作用量原理, 对作用量变分得欧拉–拉格朗日方程, 即

$$\begin{aligned}\frac{\delta S}{\delta q^i\left(t\right)} &= \int \mathrm{d}\tau \left[\frac{\partial L}{\partial q^i\left(\tau\right)}\delta\left(t-\tau\right) + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i\left(\tau\right)}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}\delta\left(t-\tau\right)\right] \\ &= \frac{\partial L}{\partial q^i} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} = 0\end{aligned} \tag{6.3}$$

或

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} = \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}^i \partial \dot{q}^j}\ddot{q}^j + \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}^i \partial q^j}\dot{q}^j + \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}^i \partial t} = \frac{\partial L}{\partial q^i}. \tag{6.4}$$

令

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \tag{6.5}$$

是与 q^i 共轭的正则动量. 当

$$\det\left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}^i \partial \dot{q}^j}\right) \neq 0, \tag{6.6}$$

即矩阵 $\left(\dfrac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}^i \partial \dot{q}^j}\right)$ 非奇异, 称体系为正则力学体系, 这时, 由 (6.4) 式可以唯一解出加速度 $\ddot{q}^i$, 并由 (6.5) 式可以唯一解出速度

$$\dot{q}^i(t) = \dot{q}^i\left(p(t), q(t), t\right). \tag{6.7}$$

这样, 由勒让德变换可以组成经典力学体系哈密顿量

$$H = \sum_i p_i \dot{q}^i - L = H\left(p(t), q(t), t\right). \tag{6.8}$$

其变分为

$$\delta H = \delta\left(p_i \dot{q}^i - L\right) = \dot{q}^i \delta p_i - \frac{\partial L}{\partial q^i} \delta q^i = \delta H\left(p, q, t\right),$$

约定上下重复指标表示求和, 上式表明哈密顿量 $H\left(p,q,t\right)$ 与 $\dot{q}$ 无关.

奇异拉格朗日力学体系　勒让德变换 ((6.8) 式) 是从位形空间到相空间的一种变换, 即

$$\begin{array}{lccc} & \text{位形空间}\,(q,\ \dot{q}) & & \text{相空间}\,(p,\ q) \\ \text{映射}\ \ \rho: & \text{切丛}\ \ TM & \longrightarrow & \text{余切丛}\ \ T^*M \end{array}$$

一般当 (6.6) 式不满足时, 即当

$$\det\left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}^i \partial \dot{q}^j}\right) = 0 \tag{6.9}$$

时, 则称为奇异拉格朗日力学体系, 或约束哈密顿体系. 这时映射 ρ 为非满映射,

$$\rho\left(TM\right) \subset T^*M,$$

即在余切丛 T^*M(相空间 $\{q,p\}$) 中存在有约束:

$$\varphi_a\left(q,p\right) = 0, \quad a = 1, \cdots, r. \tag{6.10}$$

为简化起见, 设体系哈密顿量不显含时间. 在这种情况下, 每一个约束在 $2n$ 维相空间 $\{q,p\}$ 中确定一个一超面, 这 r 个超面的非平庸交集组成约化相空间 (否则约束不能实现).

初级约束与次级约束　初级约束 (primary) 是动量定义方程 (6.5) 式的推论. 例如, 对于相对论粒子, 有

$$L = -mc^2 \sqrt{\dot{x}^\mu\left(t\right) \dot{x}_\mu\left(t\right)}, \tag{6.11}$$

其共轭动量为

$$p_\mu = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}^\mu} = -\frac{mc^2 \dot{x}^\mu}{\sqrt{\dot{x}_\mu \dot{x}^\mu}},$$

满足 $p_\mu p^\mu = m^2c^4$. 动量的四个分量不是相互独立的, 所以存在初级约束, 需做如下处理:

(1) 将它明显解出. 将其中一分量用其他分量表出, 如 $p_0 = \sqrt{m^2c^4 + \boldsymbol{p}^2}$, 但这时表达式不再具有相对论协变性.

(2) 用拉格朗日乘子方法处理. 令约束 $\varphi_a = 0$ 为弱方程 (先不为零, 算出结果最后令其为零), 而引入含约束的总哈密顿量

$$H_T = H + \lambda^a \varphi_a, \tag{6.12}$$

其中, λ^a 为最初未确定的乘子 (称为不定乘子). 任意动力学变量 $f(p,q)$ 满足运动方程

$$\dot{f}(p,q) = \{f, H_T\}_{PB} = \{f, H\}_{PB} + \lambda^a \{f, \varphi_a\}_{PB}. \tag{6.13}$$

狄拉克将动力学变量分为两类: 与所有约束 $\{\varphi_a\}$ 的泊松括号弱为零的称为第 I 类动力学变量; 否则称为第 II 类动力学变量.

此外, 约束 (6.10) 式应与体系的时间演化相自洽, 即要求下式为零:

$$\{\varphi_a, H_T\}_{PB} = \{\varphi^a, H\}_{PB} + \lambda^b \{\varphi_a, \varphi_b\}_{PB}. \tag{6.14}$$

这时可能有三种情况:

(1) (6.14) 式为恒等式, 自动满足.

(2) 将 $\{\varphi_a, H_T\}_{PB} = \phi(p,q)$ 看成新的约束, 称为次级约束 (secondary). 初级约束 (6.10) 式为动量定义方程 (6.5) 式的推论, 表明拉格朗日映射是非满映射. 次级约束 $\phi(p,q) = 0$ 需用运动方程给出.

(3) 可用来决定拉格朗日乘子 λ^a.

次级约束也应满足方程 (6.14) 式, 这样可不断重复, 直到获得一组相互自洽的约束之后, 即在相空间中可找到一个子空间约束 (称约化相空间) 使所有约束都满足.

狄拉克括号 虽然次级约束是在不同阶段得到的, 但它们没有原则上的区别, 可同等对待. 但要注意的是, 正如狄拉克将动力学变量分为两类一样, 对约束也应分为两类: 第 I 类约束用符号 $\{\varphi_i\}$ 表示, 第 II 类约束用符号 $\{\theta_i\}$ 表示. 第 I 类约束与所有其他约束都具有零泊松括号:

$$\{\varphi_i, \varphi_j\}_{PB} = \{\varphi_i, \theta_j\}_{PB} \approx 0, \tag{6.15}$$

而第 II 类约束无此性质, 通常将第 II 类约束间的泊松括号记为

$$\{\theta_i, \theta_j\}_{PB} = \tau_{ij} \quad i,j = 1,2,\cdots,N, \tag{6.16}$$

由它组成的矩阵 (τ_{ij}) 称为约束矩阵. 假定矩阵 (τ_{ij}) 非奇异, 则约束矩阵必为偶维反对称矩阵, 用 (c^{ij}) 记其逆矩阵.

为解约束体系问题, 狄拉克[①] 发明了一种新的括弧, 称为狄拉克括号 $\{,\}_D$, 满足

$$\{A,B\}_D=\{A,B\}_{PB}-\{A,\theta_i\}_{PB}\,c^{ij}\,\{\theta_j,B\}_{PB}\,. \tag{6.17}$$

可以证明 (作为习题):

(1) 狄拉克括号与泊松括号满足相同的代数关系为

$$\begin{gathered}\{A,B\}_D=-\{B,A\}_D\,,\\ \{AB,C\}_D=A\{B,C\}_D+\{A,C\}_D\,B,\\ \{A,\{B,C\}_D\}_D+\{B,\{C,A\}_D\}_D+\{C,\{A,B\}_D\}_D=0.\end{gathered} \tag{6.18}$$

(2) 所有约束间狄拉克括号为零, 且约束与哈密顿量间的狄拉克括号也为零, 即当用狄拉克括号, 所有约束平庸为零, 即

$$\{\theta_K,A\}_D=\{\theta_K,A\}_{PB}-c^{ij}\,\{\theta_K,\theta_i\}_{PB}\,\{\theta_j,A\}_{PB}=0. \tag{6.19}$$

因此, 当采用狄拉克括号, 相当于解出所有约束.

n 维球面上的约束动力学　作为一个例子, 讨论一下 n 维球面上的约束动力学. 对于 $n+1$ 维空间 $\mathbb{R}^{n+1}$ 中的 n 维球面, 可用球极坐标直接解出约束, 也可采用拉格朗日乘子, 这里采用后者. 记 ρ 为 n 维球的半径, 则在 $n+1$ 维空间中, 体系的拉氏量可写为

$$L=\frac{m}{2}\dot{x}^2-\frac{\lambda}{2}\left(x^2-\rho^2\right),\quad x=\left(x^1,\ x^2,\ \cdots,\ x^{n+1}\right). \tag{6.20}$$

如将乘子 λ 也看成为动力学自由度, 则体系就被扩充为具有 $n+2$ 个自由度的体系, 其动量为

$$\boldsymbol{p}=\frac{\partial L}{\partial\dot{\boldsymbol{x}}}=m\dot{\boldsymbol{x}}. \tag{6.21}$$

另一方面,

$$p_\lambda=\frac{\partial L}{\partial\dot{\lambda}}=0$$

可视为体系的初级约束. 记

$$\phi_1=p_\lambda, \tag{6.22}$$

则体系的哈密顿量

$$H=\boldsymbol{p}\cdot\dot{\boldsymbol{x}}+p_\lambda\cdot\dot{\lambda}-L=\frac{p^2}{2m}+\frac{\lambda}{2}\left(x^2-\rho^2\right). \tag{6.23}$$

① Dirac P A M. 1964. Lectures on Quantum Mechanics. New York: Yeshiva University.

引入体系含约束情况下的总哈密顿量

$$H_T = H + \alpha\phi_1, \tag{6.24}$$

约束 ϕ_1 应满足自洽条件

$$\{\phi_1, H_T\}_{PB} = -\frac{1}{2}\left(x^2 - \rho^2\right) \approx 0, \tag{6.25}$$

由此可得次级约束

$$\phi_2 = x^2 - \rho^2.$$

进一步由自洽条件要求

$$\{\phi_2, H_T\}_{PB} = \frac{2}{m}\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p},$$

再得次级约束

$$\phi_3 = \boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p}, \tag{6.26}$$

如此继续

$$\{\phi_3, H_T\}_{PB} = \frac{p^2}{m} - \lambda x^2 = \phi_4, \tag{6.27}$$

$$\{\phi_4, H_T\}_{PB} = -4\frac{\lambda}{m}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x} - \alpha x^2 = 0, \tag{6.28}$$

直到由最后为零的自洽条件求解出 H_T 中待定参数

$$\alpha = -4\frac{\lambda}{m}\frac{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}{x^2} \tag{6.29}$$

为止. 一旦 H_T 中待定参数 α 被解出, 则以上寻找自洽条件的过程中止. 对于上面的情况, 共有四个约束存在, 它们之间的泊松括号为

$$\{\phi_i, \phi_j\}_{PB} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & x^2 \\ 0 & 0 & 2x^2 & \dfrac{4\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p}}{m} \\ 0 & -2x^2 & 0 & 2\left(\lambda x^2 + \dfrac{p^2}{m}\right) \\ -x^2 & -\dfrac{4\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p}}{m} & -2\left(\lambda x^2 + \dfrac{p^2}{m}\right) & 0 \end{pmatrix}, \tag{6.30}$$

显然是反对称矩阵, 且由于

$$\det\{\phi_i, \phi_j\}_{PB} = 4\left(x^2\right)^4 \neq 0,$$

故所引入约束均为第 II 类约束, 其约束矩阵存在逆矩阵:

$$
c^{ij}=\begin{pmatrix}
0 & -\dfrac{\lambda x^2+\dfrac{p^2}{m}}{\left(x^2\right)^2} & \dfrac{2x\cdot P}{m\left(x^2\right)^2} & -\dfrac{1}{x^2} \\
\dfrac{\lambda x^2+\dfrac{p^2}{m}}{\left(x^2\right)^2} & 0 & -\dfrac{1}{2x^2} & 0 \\
-\dfrac{2x\cdot p}{m\left(x^2\right)^2} & \dfrac{1}{2x^2} & 0 & 0 \\
\dfrac{1}{x^2} & 0 & 0 & 0
\end{pmatrix} \tag{6.31}
$$

也为反对称矩阵.

将以上结果代入 (6.17) 式, 并计算各基本动力学变量间的狄拉克括号, 如

$$
\left\{x^i,x^j\right\}_D=0,\quad \left\{p_i,p_j\right\}_D=\frac{p_ix^j-p_jx^i}{x^2},\quad \left\{x^i,p_j\right\}_D=\delta_{ij}-\frac{x^ix^j}{x^2}, \tag{6.32}
$$

则哈密顿运动方程

$$
\dot{x}=\{x,H\}_D=\frac{p}{m},\quad \dot{p}=\{p,H\}_D=-\lambda x,\quad \dot{\lambda}=\{\lambda,H\}_D=0. \tag{6.33}
$$

此结果与通常计算相同.

第 I 类约束与规范固定条件　下面讨论约束矩阵 $\tau=(\tau_{ij})$ 为奇异的情况. 假定约束矩阵的秩为 R, 则可通过调整 $N\times N$ 维方阵秩序, 使左上角 $R\times R$ 子矩阵非奇异, 即使最初的 R 个约束为第 II 类, 其余的为第 I 类. 在这种情况下, 与第 II 类约束相应的拉格朗日乘子可被唯一的确定, 但是其他剩余乘子不能由相应的运动方程决定. 这实际上反映了运动方程的解具有某种任意性, 相当于具有规范变换不变性.

为了得到确定的解, 需引入规范固定条件

$$
\chi_a(x,p)=0,\quad a=R+1,\cdots,N. \tag{6.34}
$$

当然, 所有物理量应与规范选择无关. 在选取规范之后, 体系将具有原约束 ϕ_i 与新约束 χ_a. 要求规范条件 (6.34) 式与第 I 类约束 $\{\phi_i\}$ 之间组成的约束矩阵 $\{\chi_a,\phi_i\}_{PB}$ 非奇异, 这样就可使得所有约束都变成第 II 类约束.

仍以相对论粒子情况 (6.11) 式为例

$$
L=-mc\sqrt{\dot{x}^2},\quad \dot{x}^2=\left(\frac{\mathrm{d}x_0}{\mathrm{d}\tau}\right)^2-\frac{1}{c^2}\left(\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}{\mathrm{d}\tau}\right)^2, \tag{6.35}
$$

共轭动量

$$
p_\mu=\frac{\partial L}{\partial \dot{x}^\mu}=-mc^2\frac{\dot{x}^\mu}{\sqrt{\dot{x}^2}}. \tag{6.36}
$$

由于

$$\det\left(\frac{\partial p^\mu}{\partial \dot{x}^\nu}\right)=\det\left[-\frac{mc^2}{\sqrt{\dot{x}^2}}\left(\delta^\mu_\nu-\frac{\dot{x}^\mu\dot{x}_\nu}{\dot{x}^2}\right)\right]=0 \tag{6.37}$$

奇异, 故不能解出 $\dot{x}^\mu$, 相当于存在约束 $\phi=0$:

$$\phi=p^2-m^2c^4. \tag{6.38}$$

哈密顿量

$$H=p^\mu\dot{x}^\mu-L=0, \tag{6.39}$$

总哈密顿量

$$H_T=\alpha\phi. \tag{6.40}$$

因为 ϕ 的相容条件

$$\dot{\phi}=\{\phi,\ H_T\}_{PB}=0,$$

为恒等式, 不能解出乘子 α, 因此 ϕ 为第 I 类约束. 另外, 欧拉–拉格朗日方程

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}\left(\frac{\dot{x}_\mu}{\sqrt{\dot{x}^2}}\right)=0$$

在重参数 $\tau\to f(\tau)$ 变换下不变, 所以可定义 τ 为本征时间, 令

$$\mathrm{d}\tau^2=\mathrm{d}t^2-\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{x}^2}{c^2},$$

即

$$\dot{x}^2=1,$$

且作用量

$$S=mc^2\int\sqrt{\dot{x}^2}\mathrm{d}\tau$$

在重参数 $\tau\to f(\tau)$ 变换下也不变.

为决定乘子 α, 必须固定 τ, 引入 "规范固定" 条件

$$\chi=x_0-\tau, \tag{6.41}$$

而

$$\{\chi,\phi\}_{PB}=2p_0=\pm2\sqrt{\boldsymbol{p}^2+m^2c^4}\neq0. \tag{6.42}$$

这里 χ 条件可将原来第 I 类约束 ϕ 转化为第 II 类约束, 采用狄拉克括号, 相当于解出约束

$$p_0=H=c\sqrt{\boldsymbol{p}^2+m^2c^4}.$$

于是可以得到

$$\dot{x}_k=\{x_k,p_0\}_D=\{x_k,H\}_p=\frac{p_k}{H}, \tag{6.43}$$

$$\dot{p}_k=\{p_k,p_0\}_D=\{p_k,H\}_p=0. \tag{6.44}$$

6.2　约束体系的路径积分量子化

关于约束体系的量子化, 狄拉克建议采用如下形式的正则量子化手段:

$$\{A,B\}_D \to \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[A,B], \tag{6.45}$$

但在一般情况下, 这种算符形式的正则量子化过程很难处理. 路径积分为约束体系的量子化提供了更加方便的处理, 尤其是在分析体系的对称性与规范协变性方面, 采用 Faddeev-Senjanovic 路径积分技术更为方便①.

约束条件与规范条件　设体系所含有的约束

$$\Lambda_a(q,p) \approx 0 \quad (a=1,\cdots,m)$$

均为第 I 类约束, 因此需要选取 m 个附加条件, 即规范条件:

$$\Omega^a(q,p)=0 \quad (a=1,\cdots,m)$$

并要求约束之间的由泊松括号组成的约束矩阵非奇异. 即满足条件:

$$\det(\{\Lambda_a,\Omega^b\}) \neq 0. \tag{6.46}$$

在由 q,p 组成的 $2n$ 维相空间 Γ^{2n} 中, 约束条件和规范条件:

$$\Lambda_a(q,p)=0 \quad \Omega^a(q,p)=0 \quad (a=1,\cdots,m) \tag{6.47}$$

共同决定出一个约化的 $2(n-m)$ 维相空间 $\Gamma^{2(n-m)}$, 取相空间 Γ^{2n} 中的广义坐标为

$$q=(\Omega^a,q^*)=(\Omega^1,\cdots,\Omega^m,q_1^*,\cdots,q_{n-m}^*), \tag{6.48}$$

$$p=(p^a,p^*)=(p_1,\cdots,p_m,p_1^*,\cdots,p_{n-m}^*), \tag{6.49}$$

则由 (6.46) 式

$$\det(\{\Lambda_a,\Omega^b\})=\det\left(\frac{\partial \Lambda_a}{\partial p_b}\right)\neq 0. \tag{6.50}$$

于是, 由约束方程 $\Lambda_a(q,p)=0$ 可解出 $p_a=p_a(q^*,p^*)$.

这样确定的 q^*,p^* 为正则变量, 而体系哈密顿量

$$H^*(q^*,p^*)=H(q,p)\mid_{\Lambda=0,\Omega=0},$$

① 1. Faddeev L D. 1970. Theor. Math. Phys., (1): 1~13;
2. Senjanovic P. 1996. Ann. Phys., (100): 227~261.

体系总哈密顿量

$$H_T = H + \lambda^a \Lambda_a \tag{6.51}$$

所决定的运动方程为

$$\begin{aligned}\dot{q}^i &= \frac{\partial H}{\partial p_i} + \lambda^a \frac{\partial \Lambda_a}{\partial p_i},\\ \dot{p}_i &= -\frac{\partial H}{\partial q^i} - \lambda^a \frac{\partial \Lambda_a}{\partial q^i},\end{aligned} \tag{6.52}$$

并满足约束

$$\Lambda_a(q,p) = 0, \quad \Omega^a(q,p) = 0. \tag{6.53}$$

在引入规范条件之后, 可消去解中所含任意函数 λ^a, 最后仅剩下 q^*, p^* 满足的运动方程

$$\begin{aligned}\dot{q}^{*j} &= \frac{\partial H^*}{\partial p_j^*},\\ \dot{p}_j^* &= -\frac{\partial H^*}{\partial q^{*j}}.\end{aligned} \tag{6.54}$$

路径积分量子化 当体系量子化的过程用独立变量 q^*, p^* 表达时, 其格林函数生成泛函可以表示为

$$\begin{aligned}Z[0] &= \mathrm{tr}\,\langle x_b t_b | x_a t_a \rangle\\ &= \int \mathrm{D}q^*(t) \frac{\mathrm{D}p^*(t)}{(2\pi\hbar)^{n-m}} \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t[p_i^* \dot{q}^{*i} - H^*(q^*, p^*)]\right\}.\end{aligned} \tag{6.55}$$

但由于在实际问题中很难分离出独立变量 q^*, p^*, 故常常利用 δ 函数的性质及其在正则变换下相空间体积不变的特性, 将 (6.55) 式表达为用扩展相空间 Γ^{2n} 中坐标表述的路径积分形式. 注意到

$$\prod_{a=1}^{m} \delta(q_a)\delta[p_a - p_a(q^*, p^*)] = \prod_{a=1}^{m} \delta(\Omega^a)\delta(\Lambda_a) \det\left|\{\Lambda_a, \Omega^b\}\right|, \tag{6.56}$$

且

$$\begin{aligned}&\int \prod \mathrm{d}q^j \frac{\mathrm{d}p_j}{2\pi} \frac{\mathrm{d}\lambda^a}{2\pi} \prod_{a=1} \delta(\Omega^a) \det(\{\Lambda, \Omega\}) \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t[p_j \dot{q}^j - H(q,p) - \lambda^a \Lambda_a(q,p)]\right\}\\ =&\int \prod \mathrm{d}q^j \frac{\mathrm{d}p_j}{2\pi} \prod_a \delta(\Lambda_a)\delta(\Omega^a) \det(\{\Lambda, \Omega\}) \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t[p_j \dot{q}^j - H(q,p)]\right\}.\end{aligned} \tag{6.57}$$

将 (6.55) 式记为

$$Z[0] = \int \mathrm{D}p\mathrm{D}q \prod_a \delta(\Lambda_a)\delta(\Omega^a) \det(\{\Lambda, \Omega\}) \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t[p_i \dot{q}^i - H(q,p)]\right\}. \tag{6.58}$$

对于同时含有第 I 类约束 $\{\Lambda_a\}$ 与第 II 类约束 $\{\theta_i\}$ 的体系, 格林函数生成泛函应表示为

$$
\begin{aligned}
Z[0]=&\int \mathrm{D}q^i\mathrm{D}p_i\prod_{a=1}^{m}\delta(\Lambda_a)\delta(\Omega^a)\prod_{i=1}^{2k}\delta(\theta_i)\det(\{\Lambda_a,\Omega^b\})[\det(\{\theta_i,\theta_j\})]^{\frac{1}{2}}\\
&\times\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t[p_j\dot{q}^j- H(q,p)]\right\},
\end{aligned}
\tag{6.59}
$$

其中关于第 II 类约束相关因子的表达式可如下分析得到, 即利用正则变换

$$
\theta_i\to\theta_i'=L_{ij}\theta_j,
$$

使

$$
\{\theta_i,\theta_j\}_{PB}=\begin{pmatrix}0 & -I\\ I & 0\end{pmatrix}\equiv(J_{ij}),
\tag{6.60}
$$

于是

$$
\{\theta_i,\theta_j\}_{PB}L_{i'i}L_{j'j}=J_{i'j'}.
$$

对上式求行列式

$$
\det(\{\theta_i,\theta_j\}_{PB})(\det\boldsymbol{L})^2=\det\boldsymbol{J}=1,
\tag{6.61}
$$

所以有

$$
(\det\boldsymbol{L})^{-1}=\sqrt{|\det(\{\theta_i,\theta_j\}_{PB})|}.
\tag{6.62}
$$

对于新约束 $\theta'\equiv(p_1,\cdots,p_\mu;q_1,\cdots,q_\mu)$, 有

$$
\prod_i\delta(\theta_i')=\prod_i\delta(\theta_i)|(\det\boldsymbol{L})|^{-1}=\prod_i\delta(\theta_i)(\det(\{\theta_i,\theta_j\}_{PB}))^{\frac{1}{2}},
\tag{6.63}
$$

故 (6.59) 式成立.

6.3　S^1 环上运动的粒子

约束分析　作为前面介绍的基本理论的应用, 本节将仔细研究在 S^1 环上运动粒子的情况. 与 6.1 节中 n 维球面上的约束动力学情况 ((6.20) 式) 相当, 体系的拉氏量为

$$
L=\frac{1}{2}m(\dot{x}^2+\dot{y}^2)-V\left(\frac{x}{y}\right)-z(x^2+y^2-R^2),
\tag{6.64}
$$

其中势

$$
V\left(\frac{x}{y}\right)=V(\cot\theta)
$$

仅依赖坐标 θ, 参数 z 相当于拉格朗日乘子, 如将它也看成动力学自由度, 则体系正则动量

$$p_x = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x}, \quad p_y = \frac{\partial L}{\partial \dot{y}} = m\dot{y}, \tag{6.65}$$

而

$$p_z = \frac{\partial L}{\partial \dot{z}} = 0.$$

显然 p_z 为初级约束, 记为

$$\phi_1 = p_z.$$

体系的哈密顿量

$$H = p_x\dot{x} + p_y\dot{y} + p_z\dot{z} - L = \frac{p^2}{2m} + V\left(\frac{x}{y}\right) + z(x^2+y^2-R^2). \tag{6.66}$$

初级约束 ϕ_1 应满足自恰条件

$$\{\phi_1, \ H\}_{PB} = -(x^2+y^2-R^2) \approx 0, \tag{6.67}$$

由此可得次级约束

$$\phi_2 = x^2+y^2-R^2, \tag{6.68}$$

进一步由自恰条件

$$\{\phi_2, \ H\}_{PB} = \frac{2}{m}(xp_x+yp_y), \tag{6.69}$$

得

$$\phi_3 = xp_x + yp_y. \tag{6.70}$$

同样, 约束 ϕ_3 也应满足自恰条件, 取 $H_T = H + \lambda_1\phi_1 + \lambda_2\phi_2$, 则

$$\begin{aligned}\{\phi_3, \ H_T\}_{PB} &= \frac{1}{m}(p_x^2+p_y^2) - 2(z+\lambda_2)(x^2+y^2)\\ &\approx \frac{1}{m}(p_x^2+p_y^2) - 2(z+\lambda_2)R^2,\end{aligned} \tag{6.71}$$

由 (6.71) 式为零可解出拉格朗日乘子

$$\lambda_2 = \frac{1}{2mR^2}(p_x^2+p_y^2) - z,$$

到此, 寻找自恰条件的过程中止.

上面共找到 3 个约束, 它们之间的泊松括号组成的约束矩阵为

$$\{\phi_i, \phi_j\}_{PB} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2R^2 \\ 0 & -2R^2 & 0 \end{pmatrix}, \tag{6.72}$$

该矩阵奇异, 矩阵形式表明 ϕ_2, ϕ_3 为第 II 类约束, 而 $\phi_1 = p_z$ 为第 I 类约束, 说明相应地存在着沿 z 方向的平移不变性, 因此需要选取规范条件来消除规范不确定性:

$$\chi = z = 0. \tag{6.73}$$

将 χ 看成第四个约束

$$\phi_4 = z,$$

则上述四个约束之间的泊松括号约束矩阵

$$\{\phi_i, \phi_j\}_{PB} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 2R^2 & 0 \\ 0 & -2R^2 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = (\tau_{ij}),$$

矩阵行列式为

$$\sqrt{|\det \boldsymbol{\tau}|} = 2R^2, \tag{6.74}$$

该矩阵非奇异, 表明引入的规范条件 (6.73) 式的加入使所有四个约束均变成第 II 类型.

S^1 环覆盖空间上的路径积分 下面讨论在 S^1 环上运动粒子的格林函数生成泛函. 由 (6.58) 式得

$$\begin{aligned} Z[0] = &\lim_{N\to\infty}\int\prod_1^N \mathrm{d}x_n\mathrm{d}y_n\mathrm{d}z_n\mathrm{d}p_n^x\mathrm{d}p_n^y\mathrm{d}p_n^z\delta(p_n^z)\delta(z_n)\delta(x_n^2+y_n^2-R^2)\delta(x_n p_n^x + y_n p_n^y) \\ &\times\sqrt{|\det\boldsymbol{\tau}|}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{n=1}^N\left[\sum_{i=1}^3 p_n^i(x_n^i - x_{n-1}^i) - \frac{\epsilon}{2m}(p_n^{x^2}+p_n^{y^2})\right.\right. \\ &\left.\left.-\epsilon V\begin{pmatrix} x_n \\ y_n\end{pmatrix} - \epsilon z_n(x_n^2+y_n^2-R^2)\right]\right\}. \end{aligned} \tag{6.75}$$

取平面极坐标

$$x = r\cos\theta, \quad y = r\sin\theta,$$
$$p^x = p\cos\psi, \quad p^y = p\sin\psi,$$

并将 z_n, p_n^z 积分得

$$\begin{aligned} Z[0] = &\lim_{N\to\infty}\prod_1^N\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\theta_n\int_0^\infty r_n\mathrm{d}r_n\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\psi_n\int_0^\infty p_n\mathrm{d}p_n\delta(r_n^2-R^2) \\ &\times\delta(p_n r_n\cos(\theta_n-\psi_n))\sqrt{|\det\boldsymbol{\tau}|} \\ &\times\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{n=1}^N\left[p_n r_n(\cos(\theta_n-\psi_n) - \cos(\theta_{n-1}-\psi_n))\right.\right. \end{aligned}$$

$$-\frac{\epsilon}{2m}p_n^2 - \epsilon V(\theta_n)\Big]\Big\}, \tag{6.76}$$

注意到

$$\delta(r^2 - R^2) = \frac{1}{2R}(\delta(r-R) + \delta(r+R)),$$

$$\delta(pr\cos(\theta - \psi)) = \frac{1}{pr}\delta\left(\theta - \psi \pm \frac{\pi}{2}\right),$$

代入 (6.76) 式得 (仅考虑 $\delta(r-R)$ 的贡献)

$$\begin{aligned} Z[0] = &\lim_{N\to\infty}\prod_1^N \frac{2R^2}{2R}\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\theta_n \int_0^{\infty}\mathrm{d}p_n \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{n=1}^N\Big[-p_n R\cos(\theta_{n-1} - \psi_n)\right. \\ &\left.\left.-\frac{\epsilon}{2m}p_n^2 - \epsilon V(\theta_n)\Big]\right\}\right|_{\psi_n = \theta_n \pm \frac{\pi}{2}} \\ = &\lim_{N\to\infty}\prod_1^N \int_0^{2\pi} R\mathrm{d}\theta_n \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p_n \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{n=1}^N\Big[-p_n R\sin(\theta_{n-1} - \theta_n)\right. \\ &\left. -\frac{\epsilon}{2m}p_n^2 - \epsilon V(\theta_n)\Big]\right\}, \end{aligned} \tag{6.77}$$

利用公式[①]

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}z\sin\theta} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(z)\mathrm{e}^{\mathrm{i}n\theta}, \tag{6.78}$$

将指数上的正弦函数展开, 可完成对动量 p_n 的积分, 这时还需要利用公式

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t\mathrm{e}^{-b^2t^2}J_n(at) = (1 + (-1)^n)\frac{\sqrt{\pi}}{2b}I_{\frac{n}{2}}\left(\frac{a^2}{8b^2}\right)\mathrm{e}^{\frac{a^2}{8b^2}}, \tag{6.79}$$

其中,

$$I_n(x) \approx \frac{\mathrm{e}^x}{\sqrt{2\pi x}}\left(1 - \frac{4n^2 - 1}{8x} + O\left(\frac{1}{x^2}\right)\right) \quad (\text{当 } x \text{ 很大时}) \tag{6.80}$$

最后得

$$\begin{aligned} Z[0] = &\lim_{N\to\infty}\prod_{i=1}^N\left(\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\theta_i \sum_{l_i=-\infty}^{\infty}\right)\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{k=1}^N\Big[l_k\hbar(\theta_k - \theta_{k-1})\right. \\ &\left.-\frac{(l_k\hbar)^2}{2mR^2} - \epsilon V(\theta_{k-1})\Big]\right\}, \end{aligned} \tag{6.81}$$

① 王竹溪, 郭敦仁. 2000. 特殊函数概论. 北京: 北京大学出版社, 397.

$$\begin{aligned}\sum_{l=-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}l(\theta-\theta')}f(l)&=\sum_{l=-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p\delta(p-l)\mathrm{e}^{\mathrm{i}p(\theta-\theta')}f(p)\\&=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\mu\sum_{l=-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}\mu(p-l)}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p(\theta-\theta')}f(p)\\&=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\mu\sum_{m=-\infty}^{\infty}\delta(\mu-m)\mathrm{e}^{\mathrm{i}p(\theta-\theta'+2\pi\mu)}f(p)\\&=\sum_{m=-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p\mathrm{e}^{\mathrm{i}p(\theta-\theta'+2\pi m)}f(p),\end{aligned}$$

即泊松求和公式

$$\sum_{l=-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}l(\theta-\theta')}f(l)=\sum_{m=-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p\mathrm{e}^{\mathrm{i}p(\theta-\theta'+2\pi m)}f(p),\tag{6.82}$$

其中利用了泊松重求和公式 $\sum\limits_{n=-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}\mu m}=\sum\limits_{n=-\infty}^{\infty}\delta(\mu-n)$, 将 (6.82) 式代入 (6.81) 式可得

$$\begin{aligned}Z[0]=&\lim_{N\to\infty}\prod_{j=1}^{N}\left(\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\theta_j\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p_j\sum_{m_j=-\infty}^{\infty}\right)\\&\times\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\left[p_j(\theta_j-\theta_{j-1}+2\pi m_j)-\epsilon\frac{p_j^2}{2mR^2}-\epsilon V(\theta_{j-1})\right]\right\},\end{aligned}\tag{6.83}$$

相空间多连通必须在其普适覆盖空间完成路径积分.

进一步作参量变换, 令

$$\begin{aligned}&m_j=n_j-n_{j-1},\\&n_0=0,\quad n_1=m_1,\quad n_j=\sum_{k=1}^{j}m_k,\end{aligned}$$

以及

$$\theta'_j=\theta_j+2\pi n_j,$$

则有

$$p_j(\theta_j-\theta_{j-1}+2\pi m_j)=p_j(\theta'_j-\theta'_{j-1})$$

和

$$\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\theta_j=\int_{2n_j\pi}^{2\pi(n_j+1)}\mathrm{d}\theta'_j,$$

这样, 将积分变量 θ 的取值由 $(0,\ 2\pi)$ 拓展到了 $(-\infty,\ +\infty)$, 而由 S^1 环拓展到其覆盖空间上. 因此

$$
\begin{aligned}
Z[0] = \lim_{N\to\infty}&\left[\prod_{j=1}^{N}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}p_j}{2\pi\hbar}\prod_{j=1}^{N-1}\left(\sum_{n_j=-\infty}^{\infty}\int_{2n_j\pi}^{2\pi(n_j+1)}\mathrm{d}\theta'_j\right)\right]\\
&\times\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\left[p_j(\theta'_j-\theta'_{j-1})-\epsilon\frac{p_j^2}{2mR^2}-\epsilon V(\theta'_{j-1})\right]\right\},
\end{aligned}
\tag{6.84}
$$

最后利用势的性质

$$
V(\theta_j)\approx V(\theta_j+2n_j\pi)=V(\theta'_j),
$$

最终得到 S^1 环覆盖空间上的路径积分表达式

$$
\begin{aligned}
Z[0] = \lim_{N\to\infty}&\left(\prod_{j=1}^{N}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}p_j}{2\pi\hbar}\right)\left(\prod_{j=1}^{N}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\theta'_j\right)\\
&\times\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\left[p_j\boldsymbol{\Delta\theta}'_j-\epsilon\left(\frac{p_j^2}{2mR^2}+V(\theta'_{j-1})\right)\right]\right\}.
\end{aligned}
\tag{6.85}
$$

6.4 多连通流形上的路径积分与 Aharonov-Bohm 效应

S^1 环是一种最简单多连通流形, 本节继续分析在一维圆 S^1 环上粒子的运动. 从上节分析中看出, 在一维圆环 S^1 环上运动的粒子可看成是平面上具有约束的力学体系来进行分析, 并将问题最终转化为在其覆盖空间上路径积分的表达式 (6.85) 式.

多连通空间中的传播函数 在二维空间半径为 R 的圆环 S^1 环上运动粒子的拉氏量为

$$
L=\frac{1}{2}mR^2\dot{\theta}^2-V(\theta),\quad V(\theta+2\pi)=V(\theta),
\tag{6.86}
$$

共轭动量

$$
p_\theta=\frac{\partial L}{\partial\dot{\theta}}=mR^2\dot{\theta},
$$

哈密顿量

$$
H=p_\theta\dot{\theta}-L=\frac{p_\theta^2}{2mR^2}+V(\theta).
\tag{6.87}
$$

注意到 θ 的定义可相差 2π 的整数倍, 故可将作用于 S^1 环上的 δ 函数表示为

$$
\begin{aligned}
\delta(\theta-\theta') &= \frac{1}{2\pi}\sum_{n}\mathrm{e}^{\mathrm{i}n(\theta-\theta')}=\sum_{l=-\infty}^{\infty}\varphi_l(\theta)\varphi_l^*(\theta')\\
&=\sum_{j}\delta(\theta-\theta'+2\pi j),
\end{aligned}
\tag{6.88}
$$

其中,

$$\varphi_l(\theta)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}l\theta},$$

具有性质 $\theta\to\theta+2\pi$ 不变. 对于具有此性质的周期函数组成的希尔伯特空间, 函数 $\varphi_l(\theta)$ 正交完备, 可形式地记为

$$\begin{aligned}&\varphi_l(\theta)=\langle\theta|\,l\rangle,\quad \sum_{l=-\infty}^{\infty}|l\rangle\,\langle l|=I,\\&\langle\theta|\,\theta'\rangle=\delta(\theta-\theta'),\quad \int_{-\pi}^{\pi}\mathrm{d}\theta\,|\theta\rangle\,\langle\theta|=I,\end{aligned}\tag{6.89}$$

其中, $|\theta\rangle$ 为 $\hat{\theta}$ 的本征态, 即

$$\hat{\theta}\,|\theta\rangle=\theta\,|\theta\rangle\,,$$

$|l\rangle$ 为 $\hat{l}$ 的本征态, 即

$$\hat{l}\,|l\rangle=\hbar l\,|l\rangle\,.$$

此外, 由于 $\varphi_l(\theta)$ 在 $\theta\to\theta+2\pi$ 的变换下不变, 因此动量 p 必为 $\hbar$ 的整数倍.

下面用路径积分计算两态间的跃迁矩阵

$$\langle\psi_f|\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}T}\,|\psi_i\rangle=\lim_{N\longrightarrow\infty}\langle\psi_f|\left(I-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\epsilon\left[\frac{\hat{p}^2}{2mR^2}+V(\hat{\theta})\right]\right)^N|\psi_i\rangle\,,\quad \epsilon=\frac{T}{N}\tag{6.90}$$

插入完备关系 (6.89) 式得

$$\begin{aligned}\langle\psi_f|\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}T\right\}|\psi_i\rangle=&\lim_{N\to\infty}\prod_{j=1}^{N}\left(\int_{-\pi}^{\pi}\mathrm{d}\theta_j\right)\prod_{j=0}^{N}\left(\frac{1}{2\pi}\sum_{l_j=-\infty}^{+\infty}\right)\psi_f^*(\theta_N)\\&\times\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\left[\hbar l_j\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{\theta}_j-\epsilon\left(\frac{\hbar^2l_j^2}{2mR^2}+V(\theta_j)\right)\right]\right\}\psi_i(\theta_0),\end{aligned}\tag{6.91}$$

其中,

$$\boldsymbol{\Delta}\theta_j=\theta_j-\theta_{j-1},\quad \langle\theta\,|\psi\rangle=\psi(\theta).$$

利用泊松求和公式 (6.82) 式, (6.91) 式可表示为

$$\begin{aligned}&\langle\psi_f|\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}T\right\}|\psi_i\rangle\\&=\lim_{N\to\infty}\prod_{j=0}^{N}\left(\int_{-\pi}^{\pi}\mathrm{d}\theta_j\right)\prod_{j=0}^{N}\left(\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}p_j}{2\pi\hbar}\sum_{m_j=-\infty}^{+\infty}\right)\psi_f^*(\theta_N)\psi_i(\theta_0)\\&\quad\times\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\left[p_j(\boldsymbol{\Delta}\theta_j+2\pi m_j)-\epsilon\left(\frac{p_j^2}{2mR^2}+V(\theta_j)\right)\right]\right\}.\end{aligned}\tag{6.92}$$

对 (6.92) 式中的变量 θ 作与 (6.84) 式相同的变换, 得

$$
\begin{aligned}
&\langle\psi_f|\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}T\right\}|\psi_i\rangle\\
=&\lim_{N\to\infty}\int_{-\pi}^{\pi}\mathrm{d}\theta_N\int_{-\pi}^{\pi}\mathrm{d}\theta_0\sum_{n_N=-\infty}^{+\infty}\psi_f^*(\theta_N)\psi_i(\theta_0)\prod_{j=1}^{N-1}\left(\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}p_j}{2\pi\hbar}\right)\\
&\times\prod_{j=1}^{N}\left(\sum_{n_j=-\infty}^{+\infty}\int_{2n_j\pi}^{2\pi(n_j+1)}\mathrm{d}\theta'_j\right)\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}p_j(\Delta\theta'_j+\delta_{jN}2\pi n)-\epsilon\left(\frac{p_j^2}{2mR^2}+V(\theta'_j)\right)\right\}\\
=&\lim_{N\to\infty}\int_{-\pi}^{\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\mathrm{d}\theta_N\mathrm{d}\theta_0\sum_{n=-\infty}^{+\infty}\prod_{j=1}^{N}\left(\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}p_j}{2\pi\hbar}\right)\prod_{j=1}^{N-1}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\theta_j\psi_f^*(\theta_N)\psi_i(\theta_0)\\
&\times\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[p_j(\Delta\theta_j+\delta_{jN}2\pi n)-\epsilon H(p_j,\theta_j)]\right\}.
\end{aligned}
\tag{6.93}
$$

(6.93) 式与 (6.85) 式相当, 这表明 (6.89) 式等形式表示与约束体系的路径积分相当. 进一步取

$$
\psi_f^*(\theta_N)=\delta(\theta_N-\theta_b),\quad \psi_i(\theta_0)=\delta(\theta_0-\theta_a),\tag{6.94}
$$

则 (6.93) 式变成多连通空间费恩曼传播函数

$$
\begin{aligned}
K(\theta_b,t_b;\theta_a,t_a)=&\sum_{n=-\infty}^{\infty}\lim_{N\to\infty}\prod_{j=1}^{N}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}p_j}{2\pi\hbar}\prod_{j=1}^{N-1}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}\theta_j\\
&\times\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}[p_j\Delta\theta_j-\epsilon H(p_j,\theta_j)]\right\}\Bigg|_{\theta_0=\theta_a}^{\theta_N=\theta_b+2\pi n}\\
=&\sum_{n=-\infty}^{\infty}\lim_{n\to\infty}\left(\frac{mR^2}{2\pi\hbar\mathrm{i}\epsilon}\right)^{\frac{N}{2}}\prod_{j=1}^{N-1}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\theta_j\\
&\times\exp\left\{\frac{\mathrm{i}\epsilon}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\left[\frac{mR^2}{2}\left(\frac{\Delta\theta_j}{\epsilon}\right)^2-V(\theta_j)\right]\right\}\Bigg|_{\theta_0=\theta_a}^{\theta_N=\theta_b+2\pi n}\\
\equiv&\sum_{n=-\infty}^{\infty}\int_{\theta(t_a)=\theta_a}^{\theta(t_b)=\theta_b+2\pi n}\mathrm{D}\theta(t)\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}tL(\theta(t),\dot{\theta}(t))\right\}\\
=&\sum_{n=-\infty}^{\infty}K^{(n)}(\theta_b,t_b;\theta_a,t_a).
\end{aligned}
\tag{6.95}
$$

(6.95) 式与通常的路径积分表达式基本相同, 仅边界条件换为 $\theta(t_b)=\theta_b+2\pi n$, 表明在圆环 S^1 上, $\theta_b-\theta_a$ 与 $\theta_b-\theta_a+2\pi n$ 没有区别. 而体系的量子传播函数应为所

有 n 的叠加, n 称为绕数. 绕数 n 的出现是由于 S^1 环的拓扑结构所致, 其中 S^1 环为多连通空间.

Aharonov-Bohm 效应　现在介绍 Aharonov-Bohm 效应①, 并利用空间多连通性来检验规范势的物理意义. 众所周知, 带电粒子在电磁场中的运动遵守牛顿运动方程

$$m\ddot{\boldsymbol{x}} = \mathrm{e}\left(\dot{\boldsymbol{E}} + \frac{1}{c}\dot{\boldsymbol{x}} \times \boldsymbol{B}\right). \tag{6.96}$$

(6.96) 式右端为由电场 $\boldsymbol{E}$ 与磁场 $\boldsymbol{B}$ 决定的洛伦兹力公式. 将上面方程写成正则形式, 则体系的拉氏量函数为

$$L(\boldsymbol{x}, \dot{\boldsymbol{x}}, t) = \frac{1}{2}m\dot{\boldsymbol{x}}^2 + \frac{e}{c}\dot{\boldsymbol{x}} \cdot \boldsymbol{A} - e\phi. \tag{6.97}$$

这里必须引入矢势 $\boldsymbol{A}$ 与标势 ϕ

$$\boldsymbol{B} = \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{A}, \quad \boldsymbol{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} - \boldsymbol{\nabla}\phi, \tag{6.98}$$

共轭动量

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}^i} = m\dot{x}^i + \frac{\mathrm{e}}{c}A^i, \tag{6.99}$$

哈密顿量

$$H = \boldsymbol{p} \cdot \dot{\boldsymbol{x}} - L = \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{\mathrm{e}}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 + q\phi. \tag{6.100}$$

在经典力学与经典电动力学中, 场强 $\boldsymbol{E}, \boldsymbol{B}$ 是基本物理量. 带电粒子在电磁场中的运动方程 (6.96) 式中含有 $\boldsymbol{E}$ 与 $\boldsymbol{B}$. 如果两个势具有相同的 $\boldsymbol{E}$ 与 $\boldsymbol{B}$, 则这两个场在物理上似乎是全同的. 当场强 $\boldsymbol{E}, \boldsymbol{B}$ 用势 $\boldsymbol{A}, \phi$ 表达时, 如 (6.98) 式, 场强是由势的导数表示, 对势函数可以作规范变换而不影响场强, 如

$$\begin{aligned} \boldsymbol{A} \to \boldsymbol{A}' &= \boldsymbol{A} + \boldsymbol{\nabla} f(\boldsymbol{x}, t), \\ \phi \to \phi' &= \phi - \frac{1}{c}\frac{\partial f}{\partial t}, \end{aligned} \tag{6.101}$$

而规范变换

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{A} &= \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{A}' = \boldsymbol{B}, \\ -\frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} - \boldsymbol{\nabla}\phi &= -\frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{A}'}{\partial t} - \boldsymbol{\nabla}\phi' = \boldsymbol{E}. \end{aligned}$$

可见在经典力学中, 场强给定之后, 势 $\boldsymbol{A}, \phi$ 并没有唯一确定, 势的规范变换不改变场强, 不改变运动方程, 从而也不改变所有物理上可观察量. 这种不变性称为规范不变性.

① Aharonov Y, Bohm B. 1959. Phys. Rev., (115): 485.

当用正则量子化方法过渡到量子力学时, 须从哈密顿形式 (6.100) 式出发, 获得薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=\left[\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+e\phi\right]\psi\left(\boldsymbol{x},t\right). \tag{6.102}$$

可以证明, 薛定谔方程也具有规范不变性, 即作规范变换 ((6.101) 式) 时, 波函数作如下变换

$$\psi\to\psi'=\psi\exp\left\{\frac{ie}{\hbar c}f\right\} \tag{6.103}$$

后, 新波函数仍满足相同的薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi'=\left[\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}'\right)^2+e\phi'\right]\psi', \tag{6.104}$$

且概率密度, 概率流密度等可直接测量的物理量都与规范选择无关. 这样似乎所有物理可观察量都是规范不变的, 或者说, 似乎电磁场强度可决定所有电磁效应, 势 $\boldsymbol{A},\phi$ 仅为分析方便而引入, 本身就具有不确定性, 并没有实质性物理意义: 如果两场具有相同场强但其势 $\boldsymbol{A},\phi$ 不同, 则这两场在物理上视为全同, 这说法对吗?

1959 年 Aharonov 与 Bohm 分析了这个问题, 提出如下实验 (图 6.1): 假定电子源射出的电子几乎具有相同的能量 E, 屏后细螺线管产生静磁场 $\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$, 假设螺管足够长使螺管外无磁场, 仅有矢势 $\boldsymbol{A}$, 此时体系的拉氏量与哈密顿量为

$$L=\frac{1}{2}m\dot{\boldsymbol{x}}^2+\frac{e}{c}\dot{\boldsymbol{x}}\cdot\boldsymbol{A}-eV\left(\boldsymbol{x}\right), \tag{6.105}$$

$$H=\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+eV\left(\boldsymbol{x}\right). \tag{6.106}$$

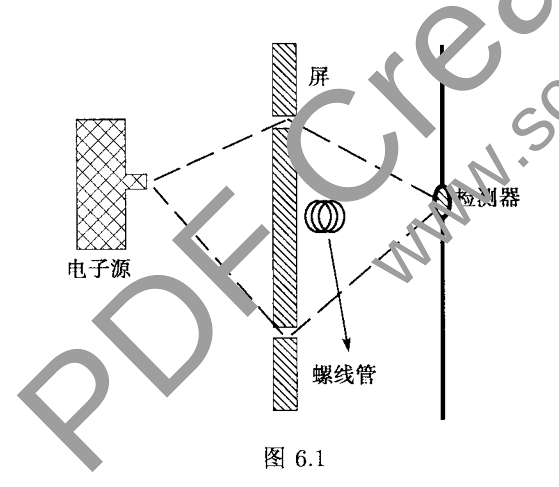


图 6.1

在研究中假设螺管内 $V(\boldsymbol{x})$ 值很大, 从而使得电子不能进入管内.

下面计算体系的费恩曼传播函数. 采用 Weyl 序:

$$\boldsymbol{\Delta} x_j = x_j - x_{j-1}, \quad \bar{x}_j = \frac{1}{2}(x_j + x_{j-1}),$$

则

$$\begin{aligned}
&K\left(x_b, t_b; x_a, t_a\right) \\
&= \lim_{n \longrightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_1^{N-1} \mathrm{d}^3 x_j \prod_1^N \frac{\mathrm{d}^3 p_j}{2\pi\hbar} \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \sum_1^N \left[p_j \boldsymbol{\Delta} x_j - \epsilon H\left(p_j, \overline{x}_j\right)\right]\right\} \\
&= \lim_{n \longrightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi\hbar\mathrm{i}\epsilon}\right)^{\frac{3N}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_1^{N-1} \mathrm{d}^3 x_j \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left[\frac{m}{2\epsilon} \boldsymbol{\Delta} x_j^2 - \epsilon \mathrm{e} V\left(\overline{x}_j\right) + \frac{e}{c} \boldsymbol{\Delta} x_j A\left(\overline{x}_j\right)\right]\right\} \\
&\equiv \int D x(t) \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d} t L_0 + \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \int_{x_a}^{x_b} \mathrm{d} x A(x)\right\},
\end{aligned} \tag{6.107}$$

式中, L_0 为无矢势的拉氏量. 类似前面关于 S^1 上运动粒子的处理, 引入柱坐标

$$x = (z, r, \theta); \quad 0 < r < \infty, \quad 0 \leqslant \theta < 2\pi,$$

以及普适的覆盖空间

$$x^{(n)} = \left(z, r, \theta^n\right), \quad \theta^n = \theta + 2\pi n, \quad n = 0, \pm 1, \cdots,$$

则可获得连通空间上的费恩曼传播函数

$$K\left(x_b, t_b; x_a, t_a\right) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha(\theta_b - \theta_a)} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i} 2\pi n \alpha} K_0^{(n)}\left(x_b^{(n)}, t_b; x_a, t_a\right) \tag{6.108}$$

其中,

$$\alpha = \frac{\mathrm{e}}{2\pi\hbar c} \oint A \mathrm{d} x,$$

式中, $K_0^{(n)}$ 的下标 0 表示无矢势时 $K^{(n)}$. 当 α 非整数时, 实验可以观察到变化, 所以, 矢势 $\boldsymbol{A}$ 有实质性的物理意义.

习　题　6

1. 对第 Ⅱ 类约束 $\{\theta_i\}$, 有 $\{\theta_i, \theta_j\}_{PB} = \tau_{ij}$, $\det \boldsymbol{\tau} \neq 0$, 当引入狄拉克括号如 (6.17) 式, 请证明所有约束间狄拉克括号为零, 即证明 (6.19) 式.
2. 对含有 $2k$ 个第 Ⅱ 类约束体系, 请证明体系格林函数生成泛函可表示为

$$\begin{aligned}
Z(0) &= \mathrm{tr}\langle x_b, t_b | x_a, t_a\rangle \\
&= \int \mathrm{D} q^i \mathrm{D} p_i \prod_{i=1}^{2k} \delta(\theta^i) [\det(\{\theta_i, \theta_j\})]^{\frac{1}{2}} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d} t [p_j \dot{q}^j - H(p, q)]}.
\end{aligned}$$

第 7 章　玻色体系相干态与路径积分

7.1　正则相干态, 路径积分的全纯表述

1926 年, 薛定谔为了寻找最接近经典规律的量子态首先提出了相干态的概念. 20 世纪 60 年代, 相干态得到系统的发展, 并被广泛应用于量子光学、泛函积分、统计物理、超导理论、量子场论等领域. 相干态具有一些独特的性质, 例如, 它是湮没算符的本征态, 并且是具有最小不确定性的量子态, 因而也是最接近经典情况的量子态. 量子相干态具有特殊的完备形式, 它们满足归一条件但不满足正交关系.

粒子数表象　一维经典谐振子系统的哈密顿量为

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega^2 q^2. \tag{7.1}$$

在量子力学中, 微观粒子的波粒二象性是通过正则坐标和正则动量满足的不对易关系来体现的, 即

$$[\hat{q}, \hat{p}] = \mathrm{i}\hbar. \tag{7.2}$$

可以将正则坐标和正则动量重新线性组合成两个量纲为一非厄米算子:

$$\hat{b} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{q} + \mathrm{i}\frac{\hat{p}}{m\omega}\right),$$

$$\hat{b}^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{q} - \mathrm{i}\frac{\hat{p}}{m\omega}\right). \tag{7.3}$$

易证它们满足对易关系

$$[\hat{b}, \hat{b}^+] = 1. \tag{7.4}$$

一维谐振子系统的哈密顿算子 (7.1) 式可表示为

$$\hat{H} = \left(\hat{b}^+\hat{b} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \tag{7.5}$$

且有

$$[\hat{H}, \hat{b}^+] = \hat{b}^+, \quad [\hat{H}, \hat{b}] = -\hat{b}, \tag{7.6}$$

即 $\hat{b}^+$ 与 $\hat{b}$ 是使能级跃迁 ± 1 的阶梯算子, $\hat{b}^+$ 称为产生算子, $\hat{b}$ 称为湮没算子.

因此哈密顿体系有离散能量谱

$$\hat{H}\left|n\right\rangle = E_n\left|n\right\rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega\left|n\right\rangle, \quad n = 0, 1, 2, \cdots. \tag{7.7}$$

注意到态矢空间有正定度规

$$|\hat{b}|n\rangle|^2 = \langle n|\hat{b}^+\hat{b}|n\rangle \geqslant 0, \tag{7.8}$$

由此易证能量本征值有下限, 但没有上限. 称能量本征值最低的态为基态, 记为 $|0\rangle$, 它必满足

$$\hat{b}|0\rangle = 0, \quad \hat{H}|0\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega|0\rangle. \tag{7.9}$$

从基态 $|0\rangle$ 出发, 重复应用算子 $\hat{b}^+$, 可得其他本征态. 由于算子 $\hat{b}^+$ 每次使本征值增加 1, 设基态 $|0\rangle$ 已归一, 并要求其他态矢 $|n\rangle$ 也归一, 则有

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\hat{b}^{+n}|0\rangle. \tag{7.10}$$

$|n\rangle$ 也称为粒子数算子 $\hat{N} = \hat{b}^+\hat{b}$ 的本征态, 即

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle, \quad n \geqslant 0. \tag{7.11}$$

由对易关系 (7.4) 式和 (7.10) 式易证

$$\begin{aligned} \hat{b}|n\rangle &= \sqrt{n}|n-1\rangle, \\ \hat{b}^+|n\rangle &= \sqrt{n+1}|n+1\rangle. \end{aligned} \tag{7.12}$$

本征态集合 $\{|n\rangle\}$ 满足如下的正交归一和完备性条件:

$$\begin{aligned} \langle n|m\rangle &= \delta_{mn}, \\ \sum_{n=0}^{\infty}|n\rangle\langle n| &= \boldsymbol{I}, \end{aligned} \tag{7.13}$$

可组成粒子数空间 (Fock 空间) 的基底. Fock 空间任意态矢 $|\psi\rangle$ ($\langle\psi|\psi\rangle = 1$) 可用基底展开, 即

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}c_n|n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}c_n\frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{b}^+)^n|0\rangle, \quad c_n = \langle n|\psi\rangle. \tag{7.14}$$

相干态表象 现在我们来介绍 Fock 空间中的相干态表示. 对基矢作幺正变换, 取幺正算子为

$$D(z) = \mathrm{e}^{z\hat{b}^+ - z^*\hat{b}},$$

将其作用于真空态 $|0\rangle$, 得

$$|z\rangle = \mathrm{e}^{z\hat{b}^+ - z^*\hat{b}}|0\rangle = \mathrm{e}^{-\frac{|z|^2}{2}}\mathrm{e}^{z\hat{b}^+}\mathrm{e}^{-z^*\hat{b}}|0\rangle = \mathrm{e}^{-\frac{|z|^2}{2}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{z^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle. \tag{7.15}$$

(7.15) 式称为相干态, 它是无穷多粒子数状态的叠加.

幺正算子 $\hat{D}(z)$ 相当于算子 $\hat{b},\hat{b}^+$ 的平移算子

$$[\hat{b},\hat{D}(z)]=z\hat{D}(z),\quad \hat{D}^+(z)\hat{b}\hat{D}(z)=\hat{b}+z, \tag{7.16}$$

$$[\hat{b}^+,\hat{D}(z)]=z^*\hat{D}(z),\quad \hat{D}^+(z)\hat{b}^+\hat{D}(z)=\hat{b}^++z^*.$$

以上引入的相干态 $\{|z\rangle\}$ 具有如下性质, 即

(1) 相干态 $|z\rangle$ 是湮没算子 $\hat{b}$ 的本征态, 即

$$\hat{b}\,|z\rangle=\hat{b}\hat{D}(z)|0\rangle=[\hat{b},\hat{D}(z)]|0\rangle=z\hat{D}(z)|0\rangle=z\,|z\rangle\,. \tag{7.17}$$

由于 $\hat{b}$ 非厄密, 故其本征值 z 必为复数, 是 Fock 空间上连续的复参数.

(2) 相干态 $|z\rangle$ 是最接近经典态的量子态. 量子态存在海森伯测不准关系, 即

$$\boldsymbol{\Delta}x\boldsymbol{\Delta}p\geqslant\frac{\hbar}{2},$$

$$\boldsymbol{\Delta}x=(\langle x^2\rangle-\langle x\rangle^2)^{\frac{1}{2}},\quad \boldsymbol{\Delta}p=(\langle p^2\rangle-\langle p\rangle^2)^{\frac{1}{2}}, \tag{7.18}$$

而相干态 $|z\rangle$ 相当于在 (7.18) 式中“$\geqslant$”符号取等号. 事实上, 由于

$$\langle z|\hat{b}|z\rangle=z,\quad \langle z|\hat{b}^+|z\rangle=z^*, \tag{7.19}$$

所以有

$$\begin{aligned}
\langle x\rangle&=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\langle z|\hat{b}^++\hat{b}|z\rangle=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(z^*+z),\\
\langle p\rangle&=\mathrm{i}\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\langle z|\hat{b}^+-\hat{b}|z\rangle=\mathrm{i}\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(z^*-z),\\
\langle x^2\rangle&=\frac{\hbar}{2m\omega}[1+(z^*+z)^2],\\
\langle p^2\rangle&=\frac{m\hbar\omega}{2}[1-(z^*-z)^2].
\end{aligned}$$

于是, 可以计算坐标和动量的方均差

$$\langle(\boldsymbol{\Delta}x)^2\rangle\equiv\langle x^2\rangle-\langle x\rangle^2=\frac{\hbar}{2m\omega},$$

$$\langle(\boldsymbol{\Delta}p)^2\rangle\equiv\langle p^2\rangle-\langle p\rangle^2=\frac{m\hbar\omega}{2},$$

所以有

$$\langle(\boldsymbol{\Delta}x)^2\rangle\langle(\boldsymbol{\Delta}p)^2\rangle=\frac{\hbar^2}{4}.$$

可见, 相干态是具有最小不确定性的量子态.

(3) 相干态集合 $\{|z\rangle\}$ 具有性质:

$$\text{非正交性}\quad \langle z|w\rangle = \mathrm{e}^{-\frac{|z|^2+|w|^2}{2}+z^*w},\quad |\langle z|w\rangle|^2 = \mathrm{e}^{-|z-w|^2}.$$

$$\text{过完备性}\quad \int \frac{\mathrm{d}^2 z}{\pi}|z\rangle\langle z| = \boldsymbol{I}. \tag{7.20}$$

其中复平面上的面积元

$$\mathrm{d}^2 z = \mathrm{d}x\mathrm{d}y = r\mathrm{d}r\mathrm{d}\theta,\quad z = x + \mathrm{i}y = r\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta},$$

所以

$$\int \frac{\mathrm{d}^2 z}{\pi}|z\rangle\langle z| = \int \frac{r\mathrm{d}r\mathrm{d}\theta}{\pi}\mathrm{e}^{-r^2}\sum_{n,n'}\frac{r^{n+n'}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta(n-n')}}{\sqrt{n!n'!}}|n\rangle\langle n'| = \sum_n |n\rangle\langle n| = \boldsymbol{I},$$

计算中用到了公式

$$\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\theta\mathrm{e}^{\mathrm{i}(n-n')\theta} = 2\pi\delta_{n,n'},\quad \int_0^{\infty}\mathrm{d}r\mathrm{e}^{-r}r^n = n!. \tag{7.21}$$

因此, 希尔伯特空间中任意量子态矢 $|\psi\rangle$ 可用相干态展开, 称为相干态表象.

$$|\psi\rangle = \int \frac{\mathrm{d}^2 z}{\pi}|z\rangle\langle z|\psi\rangle. \tag{7.22}$$

而且, 算子本身可由算子的相干态平均值来确定. 例如,

$$\hat{H}(p,q) =: \mathrm{e}^{\hat{b}^+\frac{\partial}{\partial z^*}+\hat{b}\frac{\partial}{\partial z}} : (z|\hat{H}(p,q)|z)|_{z=z^*=0}$$

其中,

$$\langle z|\psi\rangle = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}|z|^2}\sum_n \frac{z^{*n}}{\sqrt{n!}}\langle n|\psi\rangle = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}|z|^2}f(z^*). \tag{7.23}$$

由于 $|\langle n|\psi\rangle| \leqslant 1$, $f(z^*)$ 为复变量 z^* 的整函数, 或称全纯函数 (即仅是变量 z 或者 z^* 的函数). 这样任意可归一态矢 $|\psi\rangle$ 完全可以由全纯函数 $f(z^*)$ 决定. 进而由全纯函数的特性可知, 只要知道 z^* 在某区域系列点 $\{z_k\}$ 上的值, 而且此系列点有极限点, 就能完全确定此全纯函数. 因此整个复平面上 z 的相干态集合 $\{|z\rangle\}$ 是过完备的, 且各相干态线性相关, 即

$$|z\rangle = \int \frac{\mathrm{d}^2\xi}{\pi}|\xi\rangle\langle\xi|z\rangle, \tag{7.24}$$

其中,

$$\langle\xi|z\rangle = \langle 0|D^+(\xi)D(z)|0\rangle = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}(|z|^2+|\xi|^2)+z^*\xi}$$

相互非正交, 或

$$|\langle\xi|z\rangle|^2 = \mathrm{e}^{-|z-\xi|^2} \tag{7.25}$$

处处非零, 因而在相干态表象中展开的表达式非唯一. 相干态表象 $\{|z\rangle\}$ 的过完备特性和非正交特性是相干态的重要特征.

从另一方面讲, 相干态集合 $\{|z\rangle\}$ 过完备, 说明存在子集 $\{|z_n\rangle\}$ 可以组成完备集. 下面着重分析 z_k 形成复 z 平面上正则点阵的情况. 令

$$z_k = z_{mn} = m\omega_1 + n\omega_2, \tag{7.26}$$

其中, m, n 为任意整数, ω_1 与 ω_2 线性独立, $\mathrm{Im}(\bar{\omega}_2\omega_1) \neq 0$. 设正则点阵的基本元胞面积为 S, 则可以证明

① 如果 $S < \pi$, 则集合 $\{|z_{mn}\rangle\}$ 过完备;

② 如果 $S > \pi$, 则集合 $\{|z_{mn}\rangle\}$ 不完备;

③ 如果 $S = \pi$, 则集合 $\{|z_{mn}\rangle\}$ 完备, 且如移去一个态矢, 集合仍保持为完备, 但如移去两个态矢, 则不完备.

注意, 若将复 z 平面与经典相空间 (x, p) 相对应, 则面积为 π 的 z 面, 相当于面积为 $2\pi\hbar$ 的相空间普朗克 (Planck) 原胞. 以上结果表明, 在相空间中, 每个 Planck 原胞有一个状态的分布是完备的.

当 $S = \pi$, 即当每个普朗克原胞选一个相干态, 然后去掉在原点的真空态 $|0\rangle$, 得一最小的完备子集 $\{|z_{mn}\rangle\}$, 若将真空态 $|0\rangle$ 按基矢组 $\{|z_{mn}\rangle\}$ 展开, 可得集合 $\{|z_{mn}\rangle\}$ 所有态矢间线性关系.

Bargmann 表象　在通常坐标或动量表象, 态矢波函数 $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$(或 $\Psi(p) = \langle p|\Psi\rangle$) 为复函数, 一般都不是整函数. 而对于相干态 $f(z^*)$ 为整函数. 采用整函数来实现的量子态称为 Bargmann 表象, 在此表象中由于利用了解析整函数理论, 可以使许多问题简化. 将 (7.23) 式中的归一化因子吸收到积分测度里, 而把整函数作为正交完备基的空间称为 Bargmann 空间.

约化相干态　选定 Bargmann 表象后, 最好是选用约化相干态为基矢, 约化相干态 (reduced coherent state) 的定义为 (用半圆括弧表示)

$$|z) = \mathrm{e}^{z\hat{b}^+}|0\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{z^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle, \tag{7.27}$$

即与 (7.15) 式差一个归一因子. 易证

$$[\hat{b}, (\hat{b}^+)^n] = n(\hat{b}^+)^{n-1} \equiv \frac{\mathrm{d}(\hat{b}^+)^n}{\mathrm{d}(\hat{b}^+)},$$

因此

$$\hat{b}\,|z) = \hat{b}\mathrm{e}^{z\hat{b}^+}\,|0\rangle = [\hat{b}, \mathrm{e}^{z\hat{b}^+}]\,|0\rangle = z\mathrm{e}^{z\hat{b}^+}\,|0\rangle = z\,|z)\,, \tag{7.28}$$

即 $|z)$ 仍是湮没算子 $\hat{b}$ 的本征值为 z 的本征态, 且 $|z=0) = |0\rangle$ 为 Fock 空间真空态. 约化相干态的集合 $\{|z)\}$ 仍然满足非正交性和过完备性

$$\begin{aligned} &(z|\,w) = \mathrm{e}^{z^* w}, \\ &\int \mathrm{d}\mu(z)\,|z)\,(z| = I, \quad \mathrm{d}\mu(z) = \mathrm{e}^{-|z|^2}\frac{\mathrm{d}^2 z}{\pi}. \end{aligned} \tag{7.29}$$

Fock 空间中任意态矢 $|\psi\rangle$ (如 (7.14) 式) 到约化相干态 ((7.27) 式) 的投射为

$$(z|\,\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \frac{z^{*n}}{\sqrt{n!}} = \sum_{n=0}^{\infty} c_n f_n(z^*) = \psi(z^*). \tag{7.30}$$

这里 $\psi(z^*)$ 为 z^* 的整函数, 因此在 Bargmann 表象中, Fock 空间的态矢 $|\psi\rangle$ 可以用整函数表示. 因为

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1 = \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2\,,$$

所以

$$|c_n| \leqslant 1.$$

又由于

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{|c_n|}{\sqrt{n!}}\,|z|^n \leqslant \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n!}}\,|z|^n < \infty,$$

得到

$$\psi(z^*) \;\; \text{绝对收敛}, \quad \forall z \in \mathbb{C}.$$

于是, 通过到约化相干态上的投射, 可以将 Fock 空间中的任意态矢 $\psi(z)$ 转化为整函数空间中的态矢 $\psi(z^*)$(见 (7.30) 式). 整函数 $\psi(z^*)$ 有界、连续、并与态矢 $|\psi\rangle$ 一一对应, 可作为态矢 $|\psi\rangle$ 的一种表示.

约化相干态与粒子数算子本征态之间的转换矩阵

$$\begin{aligned} (z|n\rangle &= \frac{z^{*n}}{\sqrt{n!}} \equiv f_n(z^*), \\ \langle m|z) &= \frac{z^m}{\sqrt{m!}} \equiv f_m(z) \end{aligned} \tag{7.31}$$

均为整函数, 对单位分解式 (7.29) 式, 取粒子数表象矩阵元得

$$\int \mathrm{d}\mu(z) f_m(z) f_n(z^*) = \delta_{mn}. \tag{7.32}$$

因此, 希尔伯特空间的 Bargmann 表示, 即在整函数空间 (space of entire function) 可以选取正交基矢

$$f_n(z^*) = \frac{1}{\sqrt{n!}}(z^*)^n, \quad n = 0, 1, 2, 3, \cdots. \tag{7.33}$$

定义内积

$$(f_m, f_n) = \int \mathrm{d}\mu(z) f_m(z) f_n(z^*) = \delta_{mn}, \tag{7.34}$$

其中, 积分测度

$$\mathrm{d}\mu(z) = \mathrm{e}^{-|z|^2}\frac{\mathrm{d}^2 z}{\pi} = \mathrm{e}^{-|z|^2}\frac{\mathrm{d}x \wedge \mathrm{d}y}{\pi} = \mathrm{e}^{-|z|^2}\frac{\mathrm{d}z^* \wedge \mathrm{d}z}{2\pi \mathrm{i}}. \tag{7.35}$$

这样, 通过约化相干态建立的 Fock 空间的 Bargmann 表象可以将量子力学玻色体系 Fock 空间中的任意态矢 $|\psi\rangle$, 转化为整函数空间中的态矢.

算子的表征 (Symbol) 下面分析在整函数空间中算子的特性. 在 Fock 空间中任意算子 $\hat{A}(\hat{b}, \hat{b}^+)$ 可表示为

$$\hat{A} = \sum_{m,n}^{\infty} |m\rangle A_{mn} \langle n|, \quad A_{mn} = \langle m| \hat{A} |n\rangle. \tag{7.36}$$

在 Bargmann 表象下, 有

$$(z| \hat{A} |z') = \sum_{m,n=0}^{\infty} (z|m\rangle \langle m| \hat{A} |n\rangle \langle n |z') = \sum_{m,n=0}^{\infty} f_m(z^*) A_{mn} f_n(z') \equiv \mathcal{A}(z^*, z'). \tag{7.37}$$

$\mathcal{A}(z^*, z)$ 代表算子 $\hat{A} = \hat{A}(\hat{b}, \hat{b}^+)$ 作用在 Bargmann 表象的态矢 $\psi(z^*)$ 上的积分核, 称为算子 $\hat{A}$ 的表征 (symbol). 作用于 Bargmann 表象态矢 $\psi(z^*)$ 上的表征 $\mathcal{A}$ 具有与算子相似的代数结构, 下面分析其特性.

$$(\hat{b}^+\psi)(z^*) \equiv (z| \hat{b}^+ |\psi\rangle = z^*\psi(z^*) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z^*}\psi(z^*), \tag{7.38}$$

而且

$$(\hat{A}\psi)(z^*) = (z| \hat{A}(\hat{b}, \hat{b}^+) |\psi\rangle = \int \mathrm{d}\mu(z') \mathcal{A}(z^*, z') \psi(z'^*), \tag{7.39}$$

则两算子积的表征为各算子表征的卷积, 称为 Moyal * 积, 即

$$(\hat{A}\hat{B})(z^*, z') = (z| \hat{A}\hat{B} |z') = \int \mathrm{d}\mu(\omega) \mathcal{A}(z^*, w) \mathcal{B}(\omega^*, z') \equiv (\mathcal{A} * \mathcal{B})(z^*, z'). \tag{7.40}$$

可将算子 $\hat{A}$ 排成正规秩序形式, 即将算子 $\hat{A}(\hat{b}, \hat{b}^+)$ 中产生算子排在左边, 湮没算子排在右边

$$\hat{A}^N = \sum_{k,l=0}^{\infty} c_{kl} \hat{b}^{+k} \hat{b}^l,$$

那么还可以对应地引入算子的正规表征

$$\mathcal{A}^N(z^*, z') = \sum_{k,l=0}^{\infty} c_{kl} z^{*k} z'^l,$$

而对通常算子的表征有

$$\mathcal{A}(z^*, z') = (z|\,\hat{A}\,|z') = \sum_{k,l=0}^{\infty} c_{kl} z^{*k} z^l \ (z|\,z') = \mathrm{e}^{z^* z'} \mathcal{A}^N(z^*, z'). \tag{7.41}$$

算子 $\hat{A}$ 的不变量 —— 迹, 可表示为

$$\mathrm{tr}\hat{A} = \int \mathrm{d}\mu(z)(z|\hat{A}|z). \tag{7.42}$$

路径积分的相干态表示　下面分析传播函数. 前几章讨论传播函数时, 主要采用了传播函数的位形空间表示. 虽然曾提出路径积分的相空间表示, 但其坐标及动量地位不等价, 端点坐标又固定, 且动量积分比坐标多一重, 因此多有不便. 经典动力学多用相空间描述, 相空间具有辛结构, 在正则变换下不变. 在正则量子化方案中, 采用经典动力学的泊松结构与量子力学算子的对易关系对应, 但算子对易关系仅对笛卡儿坐标系适用, 在正则变换下并非不变. 大家知道, 物理实质应与坐标系的选择无关, 且笛卡儿坐标又仅对平直空间存在, 这些都表明在相空间进行量子化时需采用第三种量子化方案: 相干态表示下的路径积分量子化. 在相干态的路径积分表述中, 坐标、动量用等价形式对待, 相干态本征值的连续性使 Hilbert 空间态矢指标连续, 从而易于组成路径积分. 另外, 相干态为最小测不准态, 这一性质在时间演化过程中仍然保持不变, 因此可采用不同时间段正则化方案.

相干态表示下的费恩曼传播函数, 可利用相干态的过完备条件 (7.29) 式得

$$\begin{aligned} K(x_b, t_b; x_a, t_a) &= {}_H\langle x_b t_b|\, x_a t_a\rangle_H = \langle x_b|\,\hat{U}(t_b, t_a)\,|x_a\rangle \\ &= \int \mathrm{d}\mu(z_b) \int \mathrm{d}\mu(z_a)\, \langle x_b|\, z_b)\,\mathcal{U}(z_b^*, z_a; t_b, t_a)\,(z_a|\, x_a\rangle, \end{aligned} \tag{7.43}$$

其中, 时间演化算子

$$\hat{U}(t_b, t_a) = \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t_b}\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t_a}, \tag{7.44}$$

而演化算子的相干态表征为

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(z_b^*, z_a; t_b, t_a) &= (z_b|\hat{U}(t_b, t_a)|z_a) \\ &= \left(z_b\left|\prod_{k=0}^{N-1}\hat{U}(t_{k+1}, t_k)\right|z_a\right) \\ &= \prod_{j=1}^{N-1}\int \mathrm{d}\mu(z_j)\prod_{k=0}^{N-1}\mathcal{U}(z_{k+1}^*, z_k; t_{k+1}, t_k), \end{aligned} \tag{7.45}$$

其中, 短时传播算子为

$$\hat{U}(t_{k+1}, t_k) = 1 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\epsilon\hat{H}(\hat{b}^+, \hat{b}, t_k) + O(\epsilon^2).$$

若已排成正规序, 则其正规表征为

$$\begin{aligned}\mathcal{U}^N(z_{k+1}^*, z_k; t_{k+1}, t_k) &= 1 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\epsilon H(z_{k+1}^*, z_k; t_k) + O(\epsilon^2) \\ &= \exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\epsilon H(z_{k+1}^*, z_k; t_k)\right\} + O(\epsilon^2)\end{aligned} \tag{7.46}$$

因此, 短时传播算子的表征为

$$\mathcal{U}(z_{k+1}^*, z_k; t_{k+1}, t_k) = \exp\left[z_{k+1}^* z_k - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\epsilon H(z_{k+1}^*, z_k; t_k)\right] + O(\epsilon^2). \tag{7.47}$$

代入 (7.45) 式, 可得演化算子路径积分的相干态表征

$$\begin{aligned}\mathcal{U}(z_b^*, z_a; t_b, t_a) = \lim_{\substack{N\to\infty \\ \epsilon\to 0}} \prod_{j=1}^{N-1} \int_c \frac{\mathrm{d}z_j \mathrm{d}z_j^*}{2\pi\mathrm{i}} \exp\Bigg\{ &- \sum_{k=1}^{N-1} |z_k|^2 + \sum_{k=0}^{N-1} z_{k+1}^* z_k \\ &- \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{k=0}^{N-1} \epsilon H(z_{k+1}^*, z_k; t_k)\Bigg\}.\end{aligned} \tag{7.48}$$

必须指出, 在进行路径积分计算时, 需要讨论两种独立的复路径 $z(t)$ 与 $z^*(t)$, 其相应的边界条件分别为

$$z_0 = z(t_a) = z_a, \quad z_N^* = z^*(t_b) = z_b^*. \tag{7.49}$$

注意, 以上边界条件对每条复路径的另一端点 $z(t_b) = z_b$, $z^*(t_a) = z_a^*$ 则未加限制. 因此 (7.48) 式中指数上最初两项可改写为

$$-\sum_{k=1}^{N-1} |z_k|^2 + \sum_{k=1}^{N-1} z_k^* z_{k-1} + z_N^* z_{N-1} = z_N^* z_{N-1} - \epsilon\sum_{k=1}^{N-1} z_k^* \frac{z_k - z_{k-1}}{\epsilon}, \tag{7.50}$$

于是, 在取极限后可将 (7.48) 式写为如下的路径积分的形式:

$$\begin{aligned}\mathcal{U}(z_b^*, z_a; t_b, t_a) = &\int_{z(t_a)=z_a}^{z^*(t_b)=z_b^*} \mathrm{D}z(t)\mathrm{D}z^*(t) \\ &\times \exp\left\{z_b^* z(t_b) + \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t\, [\mathrm{i}\hbar z^*\dot{z} - H(z^*, z, t)]\right\}.\end{aligned} \tag{7.51}$$

应用举例　以强迫谐振子为例, 讨论其相干态表象下的费恩曼传播函数.

外力场中一维谐振子的哈密顿算符为

$$\hat{H}(\hat{b}^+,\hat{b},t)=\hbar\omega\left(\hat{b}^+\hat{b}+\frac{1}{2}\right)-\hbar J(t)(\hat{b}^+ +\hat{b}). \tag{7.52}$$

于是, 在相干态表象下, 谐振子的费恩曼传播函数表达式为

$$\begin{aligned}\mathcal{U}(z_b^*,z_a;t_b,t_a)=&\exp\left\{-\mathrm{i}\frac{\omega}{2}(t_b-t_a)\right\}\int_{z(t_a)=z_a}^{z^*(t_b)=z_b^*}\mathrm{D}z(t)\mathrm{D}z^*(t)\\&\times\exp\left\{z_b^*z(t_b)+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}R[z^*,z]\right\},\end{aligned} \tag{7.53}$$

其中,

$$R[z^*,z]=\mathrm{i}\hbar\int_{t_a}^{t_b}[z^*(\dot{z}+\mathrm{i}\omega z-\mathrm{i}J)-\mathrm{i}Jz]\mathrm{d}t. \tag{7.54}$$

用稳相近似方法可以解出

$$\mathcal{U}(z_b^*,z_a;t_b,t_a)=\exp\left\{-\mathrm{i}\frac{\omega}{2}(t_b-t_a)\right\}\exp\left\{z_b^*z_{cl}(t_b)+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}R[z^*,z_{cl}]\right\}, \tag{7.55}$$

式中 z_{cl} 为下面运动方程的解:

$$\frac{\delta R[z^*,z_{cl}]}{\delta z^*(t)}=\mathrm{i}\hbar(\dot{z}_{cl}+\mathrm{i}\omega z_{cl}-\mathrm{i}J)=0. \tag{7.56}$$

(7.56) 式满足边界条件 $z(t_a)=z_a$ 的解为

$$z_{cl}(t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t_a)}z_a+\mathrm{i}\int_{t_a}^{t}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-s)}J(s)\mathrm{d}s, \tag{7.57}$$

于是 (7.55) 式指数上的因子变为

$$\begin{aligned}z_b^*z_{cl}(t_b)+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}R[z^*,z_{cl}]=&z_b^*z_{cl}(t_b)+\mathrm{i}\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}tJ(t)z_{cl}(t)\\=&z_b^*\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t_b-t_a)}z_a+\mathrm{i}z_b^*\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t_b-s)}J(s)\mathrm{d}s\\&+\mathrm{i}z_a\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(s-t_a)}J(s)\mathrm{d}s\\&-\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}sJ(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-s)}J(s)\Theta(t-s),\end{aligned} \tag{7.58}$$

(7.58) 式最后一项又可化简为

$$
\begin{aligned}
&\int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t \int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}s J(t) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-s)} J(s) \Theta(t-s) \\
=&\frac{1}{2}\int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t \int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}s J(t) [\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-s)}\Theta(t-s) + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(s-t)}\Theta(s-t)] J(s) \\
=&\mathrm{i}\omega \int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t \int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}s J(t) G_F(t-s) J(s),
\end{aligned}
\tag{7.59}
$$

其中, 费恩曼传播格林函数

$$
G_F(t) \equiv \frac{1}{2\mathrm{i}\omega}[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\Theta(t) + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\Theta(-t)] = \frac{\exp\{-\mathrm{i}\omega\,|t|\}}{2\mathrm{i}\omega} \tag{7.60}
$$

满足

$$
-\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \omega^2\right) G_F(t-s) = \delta(t-s). \tag{7.61}
$$

其傅里叶变换 (积分表示) 为

$$
G_F(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}\omega'}{2\pi} \frac{\exp\{-\mathrm{i}\omega' t\}}{\omega'^2 - \omega^2 + \mathrm{i}\varepsilon}. \tag{7.62}
$$

结果与前面的结论 (2.56) 式一致.

7.2 $SU(2)$ 相干态与自旋相干态

正则相干态是在谐振子相空间中用平移群生成的相干态. 本节介绍由三维空间转动群生成的自旋相干态.

转动群的旋量表示 $SO(3)$ 与 $SU(2)$ 群是最简单的紧致非阿贝尔 (non-Abel) 李群, 其表示论, 即角动量理论是大家熟悉的内容, 这里再简单回顾一下. $SU(2)$ 群为单秩 3 参数李群, 其生成元 $\{\hat{J}_a,\ a=1,2,3 \text{ 或 } x,y,z\}$ 满足

$$
[\hat{J}_a, \hat{J}_b] = \mathrm{i}\epsilon_{abc}\hat{J}_c. \tag{7.63}
$$

令

$$
\hat{J}_\pm = \hat{J}_x \pm \mathrm{i}\hat{J}_y, \tag{7.64}
$$

则对易关系还可表示为

$$
[\hat{J}_z, \hat{J}_\pm] = \pm\hat{J}_\pm, \quad [\hat{J}_+, \hat{J}_-] = 2\hat{J}_z, \tag{7.65}
$$

Casimir 算子为

$$\hat{J}^2 = \frac{1}{2}(\hat{J}_+\hat{J}_- + \hat{J}_-\hat{J}_+) + \hat{J}_z^2 = \hat{J}_+\hat{J}_- + \hat{J}_z(\hat{J}_z - 1). \tag{7.66}$$

由群表示论知, $SU(2)$ 群的任意幺正不可约表示 $T^j(g)$ 均可用半整数 j 标志, 表示空间为 $2j+1$ 维空间, 可选 $(\hat{J}^2, \hat{J}_z)$ 的共同本征态 $|j,\mu\rangle$ 作为表示 $T^j(g)$ 的表示空间基底, 即

$$\hat{J}_z|j,\mu\rangle = \mu|j,\mu\rangle, \quad \hat{J}^2|j,\mu\rangle = j(j+1)|j,\mu\rangle. \tag{7.67}$$

本征态

$$\{|j,\mu\rangle\}, \quad -j \leqslant \mu \leqslant j,$$

张成 $SU(2)$ 群 $(2j+1)$ 维不可约表示希尔伯特空间 $\mathcal{H}^j$ 的基底, 而 $\hat{J}_\pm$ 起阶梯算子的作用, 即

$$\begin{aligned}\hat{J}_+|j,\mu\rangle &= \sqrt{(j+\mu+1)(j-\mu)}|j,\mu+1\rangle, \\ \hat{J}_-|j,\mu\rangle &= \sqrt{(j-\mu+1)(j+\mu)}|j,\mu-1\rangle,\end{aligned} \tag{7.68}$$

且

$$\hat{J}_-|j,-j\rangle = 0,$$

及

$$|j,\mu\rangle = \left(\frac{(j-\mu)!}{(j+\mu)!(2j)!}\right)(\hat{J}_+)^{j+\mu}|j,-j\rangle. \tag{7.69}$$

$SU(2)$ 相干态　选 $|\psi_0\rangle \in \mathcal{H}^j$ 为 $(2j+1)$ 维表示 $\mathcal{H}^j$ 中的固定矢量, 通过转动矩阵 $\boldsymbol{T}^j(\theta_b)$ 作用可以获得 $SU(2)$ 相干态

$$|\boldsymbol{n}\rangle = \boldsymbol{T}^j(\theta_b)|\psi_0\rangle, \quad \boldsymbol{T}^j(\theta_b) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{J}}, \quad 0 \leqslant \theta < \pi.$$

其中, $\boldsymbol{T}^j(\theta_b)$ 为作用在陪集空间 $S^2 = SU(2)/U(1)$ 上的迁移矩阵, 见图 7.1 所示. 按 7.1 节记号也可记为

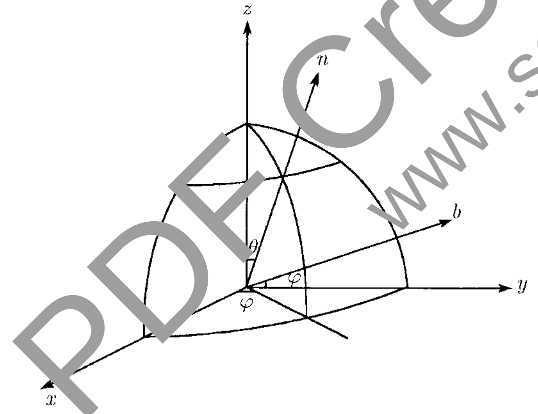


图 7.1

$$\boldsymbol{D}^j(\boldsymbol{n}) = \boldsymbol{T}^j(\theta_b) = \mathrm{e}^{\xi\hat{J}_+ - \bar{\xi}\hat{J}_-} \tag{7.70}$$

满足

$$\boldsymbol{D}^j(\boldsymbol{n}_1)\boldsymbol{D}^j(\boldsymbol{n}_2) = \boldsymbol{D}^j(\boldsymbol{n}_z)\exp\{\mathrm{i}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{n}_1,\boldsymbol{n}_2,\boldsymbol{n}_z)J_z\}, \tag{7.71}$$

其中, $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{n}_1,\boldsymbol{n}_2,\boldsymbol{n}_z)$ 为球面 S^2 上以 $(\boldsymbol{n}_1,\boldsymbol{n}_2,\boldsymbol{n}_z)$ 为顶点的测地三角形的面积.

自旋相干态 事实上, 选取任意矢量 $|j,\mu\rangle$ 作为固定矢量 $|\psi_0\rangle$, 所得相干态相互等价. 但是取 $\mu=\pm j$ 的最高 (低) 权矢, Casimir 算子 $\hat{J}^2$ 的色散 $\langle\boldsymbol{\Delta}J^2\rangle$ 最小, 故由 $|j,\pm j\rangle$ 决定的相干态体系是最稳定的相干态. 以下选取 $|\psi_0\rangle=|j,-j\rangle$ 作为固定基矢, 来作细致分析. 利用高斯分解

$$|\boldsymbol{n}\rangle = T(\theta_b)|j,-j\rangle = T(z_+)T(h)T(z_-)|j,-j\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}NT(z_+)|j,-j\rangle,$$

其中, N 为归一化因子. 若选归一化的相干态 (确定到差一常数相因子)

$$|\xi\rangle = N|\xi),$$

其中, $|\xi)$ 为约化相干态, 则

$$\begin{aligned}|\xi) &= T(z_+)|j,-j\rangle = \mathrm{e}^{\xi\hat{J}_+}|j,-j\rangle\\ &= \sum_{\mu}\left(\frac{(2j)!}{(j+\mu)!(j-\mu)!}\right)^{\frac{1}{2}}\xi^{j+\mu}|j,\mu\rangle,\end{aligned} \tag{7.72}$$

这里

$$N=(1+|\xi|^2)^{-j}.$$

因此, 得

$$\begin{aligned}|\xi\rangle &= \sum_{\mu=-j}^{j}u_\mu(\xi)|j,\mu\rangle,\\ u_\mu(\xi) &= \left(\frac{(2j)!}{(j+\mu)!(j-\mu)!}\right)^{\frac{1}{2}}(1+|\xi|^2)^{-j}\xi^{j+\mu}\end{aligned} \tag{7.73}$$

利用球面的极射投影, 即令

$$\xi = -\tan\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi},$$

则上式也可记为

$$\begin{aligned}|\xi(\theta,\varphi)\rangle &= \sum_{\mu=-j}^{j}u_\mu(\theta,\varphi)|j,\mu\rangle,\\ u_\mu(\xi) &= \left(\frac{(2j)!}{(j+\mu)!(j-\mu)!}\right)^{\frac{1}{2}}\left(-\sin\frac{\theta}{2}\right)^{j+\mu}\left(\cos\frac{\theta}{2}\right)^{j-\mu}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(j+\mu)\varphi}\\ &= \mathrm{d}^j_{\mu,-j}(\theta)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(j+\mu)\varphi}.\end{aligned} \tag{7.74}$$

其中, $\mathrm{d}^j_{\mu,-j}=\left(\dfrac{(2j)!}{(j+\mu)!(j-\mu)!}\right)^{\frac{1}{2}}\left(-\sin\dfrac{\theta}{2}\right)^{j+\mu}\left(\cos\dfrac{\theta}{2}\right)^{j-\mu}$①. 这样得到的相干态 $|\xi\rangle$ 是局域自旋算子的本征态, 故称自旋相干态.

事实上, 由于 $\hat{J}_z|j,-j\rangle=-j|j,-j\rangle$, 而

$$D(\boldsymbol{n})\hat{J}_zD(\boldsymbol{n})^{-1}=\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}=\hat{J}_r, \tag{7.75}$$

$$\hat{J}_r|\xi\rangle=-j|\xi\rangle.$$

必须注意: 相干态 $|\xi\rangle$ 不再是固定基下的“湮没算子” $\hat{J}_-$ 的本征态, 因为由 (7.73) 式易证

$$\hat{J}_-|\xi\rangle=\xi(j-\hat{J}_z)|\xi\rangle, \tag{7.76}$$

$$\hat{J}_+|\xi\rangle=\xi^{-1}(j+\hat{J}_z)|\xi\rangle. \tag{7.77}$$

为获得局域自旋算子, 在 S^2 上各点 $\xi=\xi(\theta,\varphi)$ 可取活动标架局域基

$$\begin{aligned}
\hat{J}_r&=\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}=\sin\theta\cos\varphi\hat{J}_x+\sin\theta\sin\varphi\hat{J}_y+\cos\theta\hat{J}_z,\\
&=\frac{1}{2}\sin\theta\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\hat{J}_++\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\hat{J}_-\right)-\sin\theta\hat{J}_z,\\
e_\theta&=\frac{1}{2}\cos\theta\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\hat{J}_++\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\hat{J}_-\right)-\sin\theta\hat{J}_z,\\
e_\varphi&=\frac{1}{2\mathrm{i}}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\hat{J}_+-\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\hat{J}_-\right).
\end{aligned} \tag{7.78}$$

由 $\{J_r,e_\theta,e_\varphi\}$ 组成 S^2 各点局域活动标架, $\{e_\theta,e_\varphi\}$ 是球面各点切空间 $\aleph(S^2)$ 的局域基, 即

$$e_\theta,e_\varphi\in\aleph(S^2),\quad J_r\not\subseteq\aleph(S^2), \tag{7.79}$$

进一步, 由 $\{e_\theta,e_\varphi\}$ 可组成 (局域基下的“产生和湮没算子”)

$$e_\pm=e_\theta\pm\mathrm{i}e_\varphi=\cos^2\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mp\mathrm{i}\varphi}J_\pm-\sin^2\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\varphi}J_\mp-\sin\theta J_z, \tag{7.80}$$

易证

$$e_-|\xi\rangle=0, \tag{7.81}$$

即相干态 $|\xi\rangle$ 为最稳定的局域基态.

相干态 $|\xi\rangle$ 是希尔伯特空间 $\mathcal{H}^j$ 的 $(2j+1)$ 个态的叠加, 满足过完备、非正交条件:

① 马中骐. 2006. 物理学中群论. 北京: 科学出版社, 119.

$$\int \mathrm{d}\mu_j(\xi)|\xi\rangle\langle\xi| = 1, \quad \mathrm{d}\mu_j(\xi) = \frac{2j+1}{\pi}\frac{\mathrm{d}^2\xi}{(1+|\xi|^2)^2}, \tag{7.82}$$

$$\langle\xi|\eta\rangle = \frac{(1+\bar{\xi}\eta)^{2j}}{(1+|\xi|^2)^j(1+|\eta|^2)^j}. \tag{7.83}$$

自旋相干态提供了处理自旋体系希尔伯特空间的基底. 希尔伯特空间存在 $SU(2)$ 群变换对称性, 转动群生成元可采用固定标架 $\{\hat{J}_\pm, \hat{J}_z\}$ 集合, 也可采用局域标架 $\{e_\pm, J_r\}$ 集合 (以上两组标架 Cartan 称为第 I 、第 II 参数群).

相干态是局域自旋的本征态, 即

$$\begin{aligned} J_r|\xi\rangle &= -j|\xi\rangle, \\ e_-|\xi\rangle &= 0. \end{aligned} \tag{7.84}$$

相干态 $|\xi\rangle$ 也是使 Casimir 算子 J 具有最小色散的稳定态, 满足

$$\begin{aligned} &(\hat{J}_- + 2\xi\hat{J}_z - \xi^2\hat{J}_+)|\xi\rangle = 0, \\ &\langle\boldsymbol{\Delta} J\rangle = \langle\hat{J}^2\rangle - (\langle\hat{J}_+\rangle\langle\hat{J}_-\rangle + \langle\hat{J}_z\rangle^2) = j. \end{aligned}$$

7.3 量子态演化的几何相因子 Berry 相

研究量子力学体系时, 常将其动力学变量分为两类: 一类是随时间快速变化的; 另一类是随时间缓慢变化的. 将慢变量固定, 作为背景参量, 先解有关快变量的量子力学问题, 然后允许慢变量变化, 最终得到整个体系的解. 处理原子分子体系的玻恩–奥本海默 (Born-Oppenheimer) 近似就是采用这种方案. 1984 年 Berry 认真分析了此问题, 注意到量子态演化时存在不可积几何相因子, 并很快得到实验验证. 本节对此作一简单介绍.

绝热近似下量子态的演化 假定体系哈密顿量

$$H = \frac{\boldsymbol{P}^2}{2M} + \frac{p^2}{2m} + V(\boldsymbol{R}, r), \tag{7.85}$$

其中, $\boldsymbol{P}, \boldsymbol{R}$ 为慢变量 (如原子核的动量和位置), 而 p, r 为快变量 (如电子的动量和位置). 用玻恩–奥本海默近似, 先忽略慢变量的动能及慢坐标的运动, 即将慢坐标看作参变量, 先求解快变量哈密顿量的本征值及本征态

$$\begin{aligned} &h(p, r; \boldsymbol{R}) = \frac{p^2}{2m} + V(\boldsymbol{R}, r), \\ &h(p, r; \boldsymbol{R})|n, \boldsymbol{R}\rangle = \varepsilon_n(\boldsymbol{R})|n, \boldsymbol{R}\rangle. \end{aligned} \tag{7.86}$$

当 $\boldsymbol{R}$ 随时间缓慢变化, $\boldsymbol{R} = \boldsymbol{R}(t)$, 这时 $h(\boldsymbol{R}(t)) \equiv h(p, r; \boldsymbol{R}(t))$ 通过参量 $\boldsymbol{R}(t)$ 依赖时间 t, 能量不是守恒量, 体系不存在严格定态, 应解含时薛定谔方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = h(\boldsymbol{R}(t))|\Psi(t)\rangle. \tag{7.87}$$

实际上, 在求解过程中, 可以假设 $\boldsymbol{R}(t)$ 随时变化得非常缓慢, 仍存在 $h(\boldsymbol{R}(t))$ 的瞬时本征态 (instantaneous eigenstate), 即

$$h(\boldsymbol{R}(t))|n, \boldsymbol{R}(t)\rangle = \varepsilon_n(\boldsymbol{R}(t))|n, \boldsymbol{R}(t)\rangle, \tag{7.88}$$

并且假定本征态集合 $\{|n, \boldsymbol{R}(t)\rangle\}$ 瞬时正交完备, 即满足

$$\langle n, \boldsymbol{R}(t)|m, \boldsymbol{R}(t)\rangle = \delta_{mn}. \tag{7.89}$$

将 (7.87) 式中的态用瞬时本征态 $\{|n, \boldsymbol{R}(t)\rangle\}$ 展开

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n C_n(t)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t \mathrm{d}s\varepsilon_n(\boldsymbol{R}(s))}|n, \boldsymbol{R}(t)\rangle, \tag{7.90}$$

再代回 (7.87) 式, 并利用 (7.89) 式可得

$$\dot{C}_m(t) = -\sum_n C_n(t)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t \mathrm{d}s(\varepsilon_m(\boldsymbol{R}(s))-\varepsilon_n(\boldsymbol{R}(s)))}\langle m, \boldsymbol{R}(t)|\frac{\partial}{\partial t}|n, \boldsymbol{R}(t)\rangle. \tag{7.91}$$

此外, 将 (7.88) 式对时间 t 微分, 可得 (当 $m \neq n$)

$$\langle m, \boldsymbol{R}(t)|\frac{\partial}{\partial t}|n, \boldsymbol{R}(t)\rangle = -\frac{\langle m, R(t)|\frac{\partial h}{\partial t}|n, R(t)\rangle}{\varepsilon_m(\boldsymbol{R}(t)) - \varepsilon_n(\boldsymbol{R}(t))}. \tag{7.92}$$

按照绝热定理①(绝热近似): 当参变量 $\boldsymbol{R}(t)$ 变化足够慢, 即当在 T 足够大, $T\Delta E \gg \hbar$ 时, 有

$$\frac{1}{|\boldsymbol{R}(t)|}\left|\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{R}(t)}{\mathrm{d}t}\right| \ll \frac{1}{\hbar}|\varepsilon_m(\boldsymbol{R}(t)) - \varepsilon_n(\boldsymbol{R}(t))| \tag{7.93}$$

或

$$\left|\langle m, \mathbf{R}(t)|\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|n, \mathbf{R}(t)\rangle\right| \ll \frac{1}{\hbar}|\varepsilon_m(\mathbf{R}(t)) - \varepsilon_n(\mathbf{R}(t))|, \tag{7.94}$$

体系将存在连续的瞬时本征态 $|n, \boldsymbol{R}(t)\rangle$, 这样 (7.91) 式可表示为

$$\dot{C}_m(t) = -C_m(t)\langle m, \boldsymbol{R}(t)|\frac{\partial}{\partial t}|m, \boldsymbol{R}(t)\rangle, \tag{7.95}$$

对其积分得

$$C_m(t) = C_m(0)\mathrm{e}^{-\int_0^t \mathrm{d}s\langle m, \boldsymbol{R}(s)|\frac{\partial}{\partial s}|m, \boldsymbol{R}(s)\rangle}. \tag{7.96}$$

① Messiah A. 1972. Quantum Mechanics. Amsterdam: North-Holland Publishing Company, 740.

由于 $|m, \boldsymbol{R}(t)\rangle$ 是可归一化的, 将 (7.89) 式对时间 t 微分可证

$$\mathrm{Re}\left\{\langle m, \boldsymbol{R}(t)|\frac{\partial}{\partial t}|m, \boldsymbol{R}(t)\rangle\right\} = 0, \tag{7.97}$$

因此

$$\begin{aligned} C_m(t) &= C_m(0)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma_m(t)}, \\ \gamma_m(t) &= \mathrm{i}\int_0^t \mathrm{d}s\langle m, \boldsymbol{R}(s)|\frac{\partial}{\partial s}|m, \boldsymbol{R}(s)\rangle, \end{aligned} \tag{7.98}$$

显然 $\gamma_m(t)$ 为实数. 这样在绝热近似下, h 的非简并态的时间演化可表示为

$$|\varPsi(t)\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma_n(t)}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t \mathrm{d}s\varepsilon_n(\boldsymbol{R}(t))}|n, \boldsymbol{R}(t)\rangle, \tag{7.99}$$

其中

$$\begin{aligned} \dot{\gamma}_n(t) &= \mathrm{i}\langle n, \boldsymbol{R}(t)|\frac{\partial}{\partial t}|n, \boldsymbol{R}(t)\rangle \\ &= \dot{\boldsymbol{R}}(t)\mathrm{i}\langle n, \boldsymbol{R}(t)|\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{R}}|n, \boldsymbol{R}(t)\rangle. \end{aligned} \tag{7.100}$$

Berry 相 1984 年前量子力学教科书都认为相因子角 $\gamma_n(t)$ 无物理意义, 可以吸收到态矢的定义式中. 1984 年 Berry 指出此相因子 $\gamma_n(t)$(Berry 相) 不可略去, 并且可能存在可观察效应[1].

设 $\boldsymbol{R}(t)$ 沿参数空间 ($\boldsymbol{R}$ 空间) 一闭合回路 C 运动, 当 $t = T$ 时回到初始状态: $\boldsymbol{R}(T) = \boldsymbol{R}(0)$, 则 Berry 相

$$\begin{aligned} \gamma_n(C) &= \int_0^T \mathrm{d}t\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{R}(t)}{\mathrm{d}t}\langle n, \boldsymbol{R}(t)|\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{R}}|n, \boldsymbol{R}(t)\rangle \\ &= \mathrm{i}\oint_C \mathrm{d}\boldsymbol{R}\langle n, \boldsymbol{R}(t)|\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{R}}|n, \boldsymbol{R}(t)\rangle = \oint_C \mathrm{d}\mathcal{R}\mathcal{A}(\mathcal{R}), \end{aligned} \tag{7.101}$$

其中, 积分在 $\boldsymbol{R}$ 空间沿回路 C 进行, t 为回路 C 上的参数. (7.101) 式最后一步引入了"矢量势"

$$\mathcal{A}(\mathcal{R}) = \mathrm{i}\langle n, \boldsymbol{R}(t)|\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{R}}|n, \boldsymbol{R}(t)\rangle. \tag{7.102}$$

量子态存在相因子任意性, 当态矢 $|n, \boldsymbol{R}(t)\rangle$ 的相因子改变时 (相当于选取一定规范), 有

$$|n, \boldsymbol{R}(t)\rangle \to \mathrm{e}^{\mathrm{i}\Theta(\boldsymbol{R})}|n, \boldsymbol{R}(t)\rangle, \tag{7.103}$$

同时会引起"矢量势" $\mathcal{A}(\boldsymbol{R})$ 的相应改变

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{R}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\Theta(\boldsymbol{R})}|n, \boldsymbol{R}(t)\rangle &\to \mathrm{i}\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{R}}\Theta(\boldsymbol{R})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\Theta(\boldsymbol{R})}|n, \boldsymbol{R}(t)\rangle + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\Theta(\boldsymbol{R})}\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{R}}|n, \boldsymbol{R}(t)\rangle, \\ \mathcal{A}(\boldsymbol{R}) &\to \mathcal{A}(\boldsymbol{R}) - \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{R}}\Theta(\boldsymbol{R}), \end{aligned}$$

① Berry M V. 1984. Proc. Roy. Soc. A, (392): 45.

但 Berry 相 $\gamma_n(t)$ 是规范不变的, 即

$$\gamma_n(C) = \oint_C \mathrm{d}\boldsymbol{R}\mathcal{A}(\boldsymbol{R}) = \int_S \mathrm{d}S\boldsymbol{\nabla} \times \mathcal{A} \equiv \int_S \mathrm{d}\sigma \cdot \mathcal{B}, \tag{7.104}$$

其中, S 为回路 C 包围的二维面, $\partial S = C$.

Berry 相 $\gamma_n(C)$ 可以表示为穿过闭合回路 C 的"磁通量". 以上分析要求沿回路 C 积分时绝热近似条件 (7.94) 式必须满足. 当本征能级在参数空间某点 $\boldsymbol{R}'$ 相遇: $\varepsilon_m(\boldsymbol{R}') = \varepsilon_n(\boldsymbol{R}')$, 则在该点邻域内绝热近似条件 (7.94) 式便不满足, 这相当于在 $\boldsymbol{R}$ 空间存在奇点, 而点 $\boldsymbol{R}'$ 相当于"磁单极"所在位置. Berry 相 $\gamma_n(C)$ 相当于由这些"磁单极"发出的磁场穿过回路 C 的"磁通量".

此外, 在以上分析中, 曾假设参数 $\boldsymbol{R}(t)$ 的变化非常缓慢, 体系存在瞬时本征态 $|m, \boldsymbol{R}(t)\rangle$, 且集合 $\{|m, \boldsymbol{R}(t)\rangle\}$ 正交完备, 而且所有讨论分析都是以它们为表象基矢进行的. 另外, 在量子态矢希尔伯特空间中, 也可以选择相干态表象来进行分析讨论. 相干态 $|z\rangle$ 是由连续参数 z 标记的基矢, 且集合 $\{|z\rangle\}$ 过饱和, 存在单位分解式

$$\boldsymbol{I} = \int \mathrm{d}\mu(z)|z\rangle\langle z|.$$

相干态是使希尔伯特空间表象变换群的 Casimir 算子具有最小色散的稳定态, 是最接近经典态的量子态. 利用路径积分相干态表象进行分析时, 出现在费恩曼传播函数相干态表象指数上的相因子 $-\int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}tz^*\dot{z}$((7.51) 式) 就是 Berry 相因子. 它是由相干态交叠 (内积) 决定的几何相因子, 是希尔伯特空间态矢的不可积相因子, 代表着所有相干态取一个共同相位的障碍. 虽然 Berry 相不是由体系的哈密顿量直接决定, 但确实影响着体系的动力学性质, 影响着体系的运动方程.

自旋体系中的 Berry 相　下面以电子磁共振为例分析 Berry 相的产生.

电子具有自旋角动量 $\boldsymbol{S} = (S_x, S_y, S_z)$, 它沿空间某固定方向 (如 z 方向) 只有两个可能的投射值 $S_z = \pm\frac{\hbar}{2}$. 电子的固有磁矩

$$\mu = -g\frac{e}{2m}\boldsymbol{S}.$$

自旋体系不能用经典正则变量来描写, 但可用旋量的二维表示空间来描写. 把对应于 $S_z = \pm\frac{\hbar}{2}$ 的两个态分别记为

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

则自旋算子为

$$\boldsymbol{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma},$$

其中, 泡利矩阵的表达式为

$$\boldsymbol{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

若电子在外磁场 $\boldsymbol{B} = (B_x, B_y, B_z)$ 中运动, 则体系的哈密顿量

$$\boldsymbol{H} = -\mu\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B} = -\mu\begin{pmatrix} B_z & B_x - \mathrm{i}B_y \\ B_x + \mathrm{i}B_y & -B_z \end{pmatrix},$$

由本征方程可得体系的能量本征值

$$E_{\pm} = \pm\mu\sqrt{B_x^2 + B_y^2 + B_z^2} = \pm\mu B.$$

假定体系状态随外磁场 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{B}(t)$ 缓慢变化, 外磁场 $\boldsymbol{B}$ 是三维欧氏空间 (外参量 R 空间) 的矢量, 而体系能级简并仅会发生在参量空间的原点.

　　自旋相干态提供了处理自旋体系希尔伯特空间的基底. 自旋相干态 $|\xi\rangle$ 是局域自旋的本征态

$$J_r|\xi\rangle = -\frac{1}{2}|\xi\rangle, \quad e_-|\xi\rangle = 0.$$

设外磁场 $\boldsymbol{B}(t)$ 绕空间固定坐标 z 轴以固定夹角 θ 进动, 周期 $T = \dfrac{2\pi}{\omega}$, 即

$$\boldsymbol{B}(t) = (\sin\theta\cos\phi(t), \quad \sin\theta\sin\phi(t), \quad \cos\theta), \quad \phi(t) = \omega t.$$

而

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B} = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi} \\ \sin\theta\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi} & \cos\theta \end{pmatrix}$$

易证局域自旋本征态为

$$|\xi\rangle = \begin{pmatrix} \cos\dfrac{\theta}{2} \\ \sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi(t)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix}.$$

集合 $\{|\xi\rangle\}$ 满足非正交条件

$$\langle\eta|\xi\rangle = \eta_i^*\xi_i$$

是过完备的, 且存在单位分解式

$$\int\frac{\mathrm{d}^2\xi}{2\pi}|\xi\rangle\langle\xi| = I.$$

类似 7.2 节讨论, 可得费恩曼传播函数路径积分的相干态表示

$$\mathcal{U}(z_b^*, z_a; t_b, t_a) = \int_{z(t_a)=z_a}^{z^*(t_b)=z_b^*} \mathrm{D}z(t)\mathrm{D}z^*(t) \mathrm{e}^{z_b^* z(t_b) + \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t[\mathrm{i}\hbar z^* \dot{z} - H(z^*, z; t)]},$$

其中, 指数上的相因子

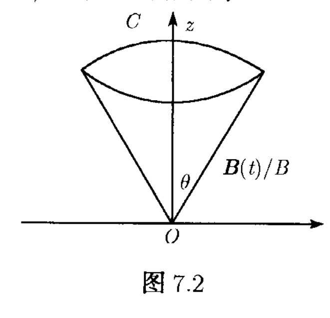


图 7.2

$$\gamma(T) = \int_0^T \mathrm{d}t \mathrm{i}\ z^* \dot{z} = \mathrm{i}\int_0^T \mathrm{d}t \left(\cos\frac{\theta}{2}, \sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi(t)}\right) \times \begin{pmatrix} 0 \\ \mathrm{i}\dot{\phi}(t)\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi(t)} \end{pmatrix} = -\frac{1}{2}(1-\cos\theta)\int_0^T \mathrm{d}t \frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}t}.$$

当 $T = \frac{2\pi}{\omega}$ 时, 在参数空间形成闭合路径 C, 则 Berry 相

$$\gamma(C) = -\frac{1}{2}(1-\cos\theta)2\pi = -\frac{1}{2}\Omega(C),$$

其中

$$\Omega(C) = 2\pi(1-\cos\theta)$$

为旋转磁场 $\boldsymbol{B}(t)$ 经历一个周期后在参数空间中所张的立体角, 见图 7.2.

在参数空间的单位球面上, 任意两条具有相同起点和终点的路径 $\boldsymbol{n}_1(t)$ 与 $\boldsymbol{n}_2(t)$, 当它们张有相同的立体角, 就会具有相同的 Berry 相, 在此意义上 Berry 相是一几何相因子. 另一方面, 当采用稳相近似分析费恩曼传播函数时, 费恩曼传播函数的指数上的因子相当于经典作用量泛函:

$$S[z(t)] = \int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t[\mathrm{i}\hbar z^* \dot{z} - H(z^*, z; t)].$$

对固定端点作变分, 由 $\delta S = 0$, 可得经典运动方程

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{n} = \boldsymbol{B} \times \boldsymbol{n},$$

这是经典陀螺的运动方程, 速度与力成正比, 且速度与力方向垂直. 经典陀螺在相空间中运动, 当沿一闭合曲线 C 转一圈后会相差一个相角 $\boldsymbol{\Delta}\theta_c$, 即 Hannay 角, 它相当于量子体系 Berry 相因子的经典对应.[1]

[1] Hannay J. 1985. J. Phys. A, (18): 221.

7.4 动力学对称群与量子相空间, 推广的相干态

对称性与对偶性在理论物理中起着十分重要的作用, 在量子–经典对应中, 对称性及其破缺仍然起着重要作用.

研究动力学体系对称性的基本数学工具是群论. 经典动力学哈密顿体系的基本结构是相空间的辛结构. 这里要分析的不仅是位形空间上的对称变换, 而且要着重分析相空间保持辛结构不变的正则变换, 分析动力学对称变换集合: 动力学对称群. 用动力学对称群研究动力学体系的可积性, 动力学对称性破缺导致的相变, 以及体系不可积所导致的混沌的出现.

态叠加原理说明量子力学的数学结构基本上是线性的. 量子力学波函数为希尔伯特空间中的态矢, 基本物理观察量的集合组成自伴算子的体系, 其代数结构由对易关系组成, 其指数映射形成动力学群.

为分析量子–经典对应, 通常采用路径积分量子化. 当量子改正未明显改变经典相空间的结构时, 采用 WKB 半经典近似 (见第 3 章) 可以得到许多有意义的结果. 进一步, 当采用推广的相干态路径积分量子化时, 则用动力学对称群的表示空间作为量子相空间, 由于量子相空间具有丰富的几何结构: 复结构与辛结构, 十分便利于分析量子–经典对应. 后面还将介绍基于推广的相干态路径积分的半量子近似, 可使有效作用量包括量子改正的主要阶 (leading order), 有利于分析混沌现象中的量子涨落.

动力学对称群 本节将介绍量子力学体系的动力学对称群, 分析哈密顿体系的附加对称性 (hidden symmetry). 着重介绍动力学简并群 DDG(dynamic degeneracy group) 与动力学对称群 DSG(dynamic symmetric group) 这两个重要概念. 后者又简称为动力学群 (DG). 最后介绍基于动力学群而建立的推广相干态. 本节中为简单起见, 省略了算符上的 "ˆ" 记号.

以大家熟悉的氢原子为例, 在位形空间中势能具有 $O(3)$ 对称性, 角动量算子

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$$

与哈密顿量算子

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{r}$$

对易, 是体系的守恒量

$$[H, \boldsymbol{L}] = 0, \quad [L_i, L_j] = \mathrm{i}\epsilon_{ijk} L_k. \tag{7.105}$$

一般的中心力场在位形空间变换下具有 $O(3)$ 对称性. 而对于氢原子, 在相空间中还具有附加对称性. 事实上, 氢原子动力学简并群为 $SO(4)$ 群, 与哈密顿量 H

交换的守恒量除角动量外, 还有 Runge-Leng 矢量

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p} + \frac{\boldsymbol{r}}{r},$$

容易证明

$$[H, \boldsymbol{A}] = 0. \tag{7.106}$$

Runge-Leng 矢量 $\boldsymbol{A}$ 指向椭圆轨迹主轴, 大小比例于轨迹偏心率, 在空间转动群 $O(3)$ 的作用下, 按矢量算子变换

$$[A_i, L_j] = \mathrm{i}\epsilon_{ijk} A_k, \tag{7.107}$$

$$[A_i, A_j] = -2\mathrm{i}\epsilon_{ijk} H L_k. \tag{7.108}$$

注意集合 $\{L_i, A_i\}$ 并未形成封闭的李代数, 仅当含有哈密顿量 H 时才封闭, 且对易关系是非线性的.

当 (7.108) 式中 H 用某一束缚态能量值 $E(<0)$ 代替后, 则集合 $\{L_i, A_i\}$ 形成 $so(4)$ 代数, 亦即当氢原子处于确定的束缚能态时, 体系按 $SO(4)$ 不可约表示变换, 体系哈密顿量具有 $SO(4)$ 对称性. 若令 $g \in SO(4)$, 则

$$g^{-1} H g = H.$$

但基态无此对称性,$g|\psi_0\rangle \neq |\psi_0\rangle$, 所以基态是简并的, 这是由于氢原子这种特殊中心力场造成的偶然简并 (accident degeneracy).

大家已熟知, Casimir 算子为对称群不可约表示中的不变量, 1926 年泡利将氢原子的哈密顿量表示成动力学简并群 (即 $SO(4)$ 群) 的 Casimir 算子 $C_{O(4)}$ 的函数, 并对氢原子能级进行了分类.

下面进一步分析在对称群不可约表示间缠结算子 (intertwining operator), 又称谱间跃迁算子 (类似于谐振子的阶梯算子 $\{\hat{b}_i, \hat{b}_i^+\}$). 他们生成的李代数又称为谱生成代数 SGA(spectrum generating algebra), 其指数映射将得到动力学对称群 DG. 可积体系氢原子的动力学群为 $SO(4,2)$, 这将在下面例 4 中认真分析. 这里仅简单指出, 对于动力学群中一般群元 $g \in DG$,

$$g^{-1} H g \neq H, \quad g|\psi_0\rangle \neq |\psi_0\rangle.$$

量子力学中基本物理观察量的集合 $\{A_a\}$ 组成自伴算子体系, 它们 (包括哈密顿量 H 在内) 常可以表示为基本算子集 $\{T_i\}$ 的函数

$$H = H(T_i), \quad A_a = A_a(T_i), \quad [T_i, T_j] = C_{ij}^k T_k. \tag{7.109}$$

基本算子集 $\{T_i\}$ 组成的李代数称为动力学体系的动力学代数, 其指数映射为动力学群 (DG)

$$G=\left\{\exp\left(\mathrm{i}\sum_j \alpha_j T_j\right)\right\}, \tag{7.110}$$

并且按照量子力学要求, 上面的映射必须为幺正指数映射. 量子力学中的希尔伯特态矢空间 $\mathcal{H}$ 为动力学群的表示空间, 常可分解为动力学群不可约表示空间 $\mathcal{H}_k$ 的直和

$$\mathcal{H}=\oplus\sum d_k\mathcal{H}_k,$$

其中, d_k 为不可约表示的简并度.

几个常见量子力学体系的代数结构 下面举些简单的例子来说明量子力学体系有关代数结构方面的特点.

例 1 一维谐振子 体系的哈密顿量为

$$H=\frac{1}{2}(p^2+\omega^2x^2)=\left(\hat{b}^+\hat{b}+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \tag{7.111}$$

其中已取振子质量 $m=1$, 并选振子的产生、湮没算子 $\{\hat{b}_i,\hat{b}_i^+\}$ 为量纲为一算子, 即

$$\begin{aligned}\hat{b}&=\frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}(\omega\hat{x}+\mathrm{i}\hat{p}),\\ \hat{b}^+&=\frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}(\omega\hat{x}-\mathrm{i}\hat{p}),\end{aligned} \tag{7.112}$$

它们满足

$$[\hat{b},\hat{b}^+]=1. \tag{7.113}$$

一维谐振子体系的动力学代数为 Heisenbery–Weyl 代数, 记为

$$h_4=\{\hat{b},\hat{b}^+,I,\hat{n}=\hat{b}^+\hat{b}\},$$

这四个代数元素满足对易关系 (7.113) 式以及

$$[\hat{n},\hat{b}^+]=\hat{b}^+,\quad [\hat{n},\hat{b}]=-\hat{b}, \tag{7.114}$$

其余对易子为零. h_4 为 2 秩 4 维非半单李代数, 其对应的希尔伯特空间为振子 Fock 空间, 基底由 $\{|n\rangle, n=0,1,2,\cdots\}$ 组成, 都是哈密顿量 H 的本征态:

$$H|n\rangle=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega|n\rangle. \tag{7.115}$$

Heisenbery–Weyl 代数指数映射组成的 Heisenbery–Weyl 群 H_4 为谐振子体系的动力学群.

例 2 自旋为 $\hat{J}$ 的纯自旋体系 该体系的动力学群为 $SU(2)$, 动力学代数由 $\{\hat{J}_+, \hat{J}_-, \hat{J}_0\}$ 组成:

$$[\hat{J}_+, \hat{J}_-] = 2\hat{J}_0, \quad [\hat{J}_0, \hat{J}_\pm] = \pm\hat{J}_\pm. \tag{7.116}$$

它们组成单秩三维单李代数 $su(2)$, 相应的希尔伯特空间为 $su(2)$ 代数的 $(2j+1)$ 维不可约表示空间, 其基底由

$$\{|jm\rangle, m = -j, -j+1, \cdots, j\} \tag{7.117}$$

组成, 其中 j 可为任意整数或半整数, 标志着 $su(2)$ 李代数的 Casimir 算子 $C_2 \equiv J^2$ 的本征值:

$$\hat{J}^2|jm\rangle = j(j+1)|jm\rangle, \quad \hat{J}_0|jm\rangle = m|jm\rangle. \tag{7.118}$$

对于自旋为 $\dfrac{1}{2}$ 的体系, $su(2)$ 代数的二维表示矩阵可由泡利矩阵表示, 自旋算子 $\{\hat{S}_+, \hat{S}_-, \hat{S}_0\}$ 可表示为

$$\hat{S}_\pm = \frac{1}{2}(\sigma_1 \pm \sigma_2), \quad \hat{S}_0 = \frac{1}{2}\sigma_3. \tag{7.119}$$

哈密顿量可表示为 $\{\hat{S}_+, \hat{S}_-, \hat{S}_0\}$ 的函数. 通常选择使 H 容易对角化的基底, 以方便得到体系的能谱及相应本征态. 例如, 在磁场 $\boldsymbol{B}$ 中的电子, 选 $\boldsymbol{B}$ 沿 z 方向, 则

$$\hat{H} = -\mu\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{S} = -\mu\boldsymbol{B}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}_0, \tag{7.120}$$

能谱为 $E_m = -\mu Bm$.

对于比较复杂的动力学体系, 可先选择其特殊的动力学简并子代数来分析, 然后再进一步扩展得到整个动力学代数.

例 3 中心势 体系具有中心势场时可以进行分离变量, 径向运动谱生成李代数 $so(2,1)$ 或 $su(1,1)$. 生成元 $\{K_i, i=1,2,3\}$ 为 1 秩三维半单李代数 (实李代数, 实形式)

$$[K_1, K_2] = -\mathrm{i}K_3, \quad [K_2, K_3] = \mathrm{i}K_1, \quad [K_3, K_1] = \mathrm{i}K_2. \tag{7.121}$$

体系的 Casimir 算子为

$$K^2 = K_3^2 - K_1^2 - K_2^2, \tag{7.122}$$

体系动力学群为 $SU(1,1)$, 为非紧群, 其不可约么正表示必定是无穷维的, 例如, 下有界上无界的表示 $D^+(k)$ 的基矢 $\{|k,n\rangle\}$ 为

$$|k,n\rangle = \sqrt{\frac{\Gamma(2k)}{n!\Gamma(2k+n)}}(K_+)^n|k,0\rangle, \tag{7.123}$$

满足

$$K^2|k,n\rangle = k(k-1)|k,n\rangle,$$
$$K_3|k,n\rangle = (k+n)|k,n\rangle. \tag{7.124}$$

无穷维不可约表示 $D^+(k)$ 的最低态 $|\psi_0\rangle = |k,0\rangle$, $K_\pm = K_1 \pm \mathrm{i}K_2$, $K_-|\psi_0\rangle = 0$.

例 4　氢原子　前面已经分析过氢原子体系的动力学简并代数 $\{\boldsymbol{L}, \boldsymbol{A}\}$, 其对易关系见 (7.105) 式、(7.107) 式和 (7.108) 式组成的 $so(4)$ 代数. 代数的生成元也可用两套玻色振子表示为

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}, \quad L_i = \frac{1}{2}(a^+\sigma_i a + b^+\sigma_i b), \tag{7.125}$$

$$\boldsymbol{A} = \frac{1}{2}\boldsymbol{r}p^2 - \boldsymbol{p}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}) - \frac{1}{2}\boldsymbol{r}. \tag{7.126}$$

下面进一步分析谱生成代数 (动力学代数). 与前面 $so(4)$ 代数对易的谱生成元有

$$K_0 = \frac{1}{2}(rp^2 + r) = \frac{1}{2}(a^+a + b^+b + 2), \tag{7.127}$$

$$K_1 = \frac{1}{2}(rp^2 - r) = \frac{1}{2}(a^+\sigma_2 b^+ + a\sigma_2 b), \tag{7.128}$$

$$K_2 = \boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p} - i = \frac{1}{2}(a^+\sigma_2 b^+ - a\sigma_2 b). \tag{7.129}$$

这三个算子都是与转动群对易的标量算子, 它们形成 $so(2,1)$ 李代数, 对易关系如 (7.121) 式. 以上九个生成元形成的李代数并不封闭, 而整个动力学代数还需再补充两个矢量算子

$$\boldsymbol{B} = \frac{1}{2}\boldsymbol{r}p^2 - \boldsymbol{p}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}) + \frac{1}{2}\boldsymbol{r}, \quad B_i = -\frac{1}{2}(a^+\boldsymbol{\sigma}_i\boldsymbol{\epsilon} b^+ - a\boldsymbol{\epsilon}\boldsymbol{\sigma}_i b); \tag{7.130}$$

和

$$\boldsymbol{M} = r\boldsymbol{p}, \quad M_i = -\frac{1}{2}(a^+\sigma_2\boldsymbol{\epsilon} b^+ + a\boldsymbol{\epsilon}\sigma_2 b); \tag{7.131}$$

其中,

$$\boldsymbol{\epsilon} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

这样, 集合 $\{\boldsymbol{L}, \boldsymbol{A}, K_0, K_1, K_2, \boldsymbol{B}, \boldsymbol{M}\}$ 形成动力学代数 $so(4,2)$, 它是 3 秩 15 维的非紧致李代数. 相互交换的力学量完备集 (暂忽略自旋自由度) 为 $\{H, L^2, L_3\}$. 希尔伯特空间中的基矢 $\{|n,l,m\rangle\}$ 满足

$$K_3|nlm\rangle = n|n,l,m\rangle, \tag{7.132}$$

$$L^2|nlm\rangle = l(l+1)|n,l,m\rangle, \tag{7.133}$$

$$L_z|nlm\rangle = m|n,l,m\rangle, \tag{7.134}$$

其中, $n = k + n'$, $k = l + 1$, n' 为径向量子数, l 为角量子数, m 为磁量子数. 而哈密顿量

$$H = -\frac{1}{2K_3^2}.$$

以上的动力学代数 $so(4,2)$ 完全揭示了氢原子的整个谱函数结构. 氢原子的动力学对称群为 $SO(4,2)$.

推广的相干态 利用推广的相干态来实现的量子体系动力学群的表示空间, 称为量子相空间, 是量子动力学体系的态空间, 体系各动力学观察量可表示为作用在量子相空间上算子. 7.1 节曾指出, 谐振子体系可采用 Fock 空间 (粒子数空间) 表象, 进一步还可采用相干态表象, 而对于没有经典对应的动力学自由度, 则要采用推广的相干态来实现量子相空间. 例如自旋体系, 自旋相干态就是一种推广的相干态.

当量子动力学体系的动力学代数为半单李代数, 设其秩为 l, 生成元为 n 维, 则体系便有 l 个 Casimir 算子, 它们可与所有李代数的元素交换, 其余 $(n-l)$ 个元素必为权空间上的升降算子. 量子相空间即动力学群的不可约表示空间, 它们可由 $k = \dfrac{1}{2}(n-l)$ 个升算子作用于最低权态 $|\psi_0\rangle$ 上产生. 如上面例 2 中的自旋体系 $\{X_i^+\}$, 其动力学代数为 $su(2)$, 有一个 Casimir 算子 $\hat{J}^2$, 有一个升算子 $\hat{J}_+$, 而整个 $(2j+1)$ 维不可约表示的基矢 $\{|jm\rangle\}$, 可由

$$|j,m\rangle = \sqrt{\frac{(j-m)!}{(j+m)!(2j)!}}(\hat{J}_+)^{j+m}|j,-j\rangle$$

生成.

在 7.1 节中, 曾将谐振子体系在 Fock 空间中的态矢转化为相干态表象中的态矢, 利用产生湮没算子来实现标准相干态

$$|z\rangle = \mathrm{e}^{z\hat{b}^\dagger - z^*\hat{b}}|0\rangle \tag{7.135}$$

完全类似地, 利用动力学代数的升降算子 $\{X_i^\pm\}$ 作用于最低权 $|\psi_0\rangle$ 上, 可以得到推广的相干态

$$|z^1\cdots z^k\rangle = \exp\left(\sum_{i=1}^{k} z^i X_i^+ - z^{i*}X_i\right)|\psi_0\rangle. \tag{7.136}$$

如此推广的相干态为量子体系希尔伯特空间提供了一种连续基底. 例如, 令 G 代表动力学群, H 为对固定态矢 $|\psi_0\rangle$ 作用的 G 的最大稳定子群, 则量子相空间同构于陪集空间 G/H. 易证 G/H 为复流形, 且具有辛结构, 易于分析量子–经典对应.

由于上述性质完全由量子力学得到, 因此对于没有经典对应的动力学自由度 (如自旋体系) 同样也适用.

量子力学体系可用量子相空间中的路径积分相干态很好地描述, 用相干态公式计算费恩曼传播子时, 体系的有效量子作用量的一般形式可写为

$$S[z(t), z^*(t)] = \int_0^t \mathrm{d}\tau \left\{ \langle \Omega | \mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} | \Omega \rangle - H(z(\tau), z^*(\tau)) \right\}, \tag{7.137}$$

其中, 右端第一项相当于 Berry 相因子, 而且在一般情况下, 稳相轨迹不由经典动力学决定, 所以, 体系的半量子哈密顿完全由量子力学决定.

比较而言, 第 3 章介绍的半经典近似, 相当于在经典动力学基础上加以量子改正, 这仅当量子改正未明显改变经典相空间结构时才适用. 量子相空间相干态路径积分的稳相近似常称为半量子近似, 是基于推广的相干态在量子相空间上的路径积分稳相近似.

习 题 7

1. 请证明相干态是具有最小不确定性的量子态, 即 $\langle(\boldsymbol{\Delta}x)^2\rangle\langle(\boldsymbol{\Delta}p)^2\rangle = \frac{\hbar^2}{4}$.
2. 请证明 $\hat{J}_-|\xi\rangle = \xi(j - \hat{J}_z)|\xi\rangle$, $\hat{J}_+|\xi\rangle = \xi^{-1}(j + \hat{J}_z)|\xi\rangle$, 并进一步证明自旋相干态 $|\xi\rangle$ 是使 Casimir 算子具有最小色散的稳定态, 即满足:

$$(\hat{J}_- + 2\xi\hat{J}_z - \xi^2\hat{J}_+)|\xi\rangle = 0$$

$$\langle\boldsymbol{\Delta}J\rangle = \langle\hat{J}^2\rangle - (\langle\hat{J}_+\rangle\langle\hat{J}_-\rangle + \langle\hat{J}_z\rangle^2) = j$$

第 8 章　费米体系相干态与路径积分，超对称量子力学

8.1　Grassmann 变量及其微积分，费米谐振子及其路径积分表示

第 7 章介绍了玻色体系 Fock 空间上的路径积分，现在来分析费米体系 Fock 空间的情况.

Clifford 代数　费米体系受泡利不相容原理约束，每态仅有一个粒子或无粒子. 因此，费米体系的湮没和产生算子 $\hat{a}_j, \hat{a}_j^+$ 均为幂零算子，满足反对易关系：

$$\{\hat{a}_i, \hat{a}_j^+\} = \delta_{ij}, \quad \{\hat{a}_i, \hat{a}_j\} = 0 = \{\hat{a}_i^+, \hat{a}_j^+\}. \tag{8.1}$$

由任意有限个费米子生成元 $\{\hat{a}_i, \hat{a}_j\}$ 生成的 Clifford 代数为有限维，故费米体系常用矩阵表示. 如，对于单费米子体系，湮没算子 $\hat{a}$ 与产生算子 $\hat{a}^+$ 满足

$$\{\hat{a}, \hat{a}^+\} = 1, \quad \{\hat{a}, \hat{a}\} = 0 = \{\hat{a}^+, \hat{a}^+\}. \tag{8.2}$$

它们可用二维矩阵来表示，如用泡利矩阵

$$\boldsymbol{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

它们满足

$$[\boldsymbol{\sigma}_x, \boldsymbol{\sigma}_y] = 2\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_z, \quad \{\boldsymbol{\sigma}_x, \boldsymbol{\sigma}_y\} = 0, \tag{8.3}$$

可以将单费米子的态矢用二维列矩阵表示为

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{8.4}$$

再定义

$$\boldsymbol{\sigma}_+ = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_x + \mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_y) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_+ |1\rangle = |0\rangle, \quad \boldsymbol{\sigma}_+ |0\rangle = 0,$$

$$\boldsymbol{\sigma}_- = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_x - \mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_y) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_- |0\rangle = |1\rangle, \quad \boldsymbol{\sigma}_- |1\rangle = 0. \tag{8.5}$$

于是, 湮没算子 $\hat{a}$ 可用 $\boldsymbol{\sigma}_+$ 表示, 而产生算子 $\hat{a}^+$ 可用 $\boldsymbol{\sigma}_-$ 表示.

费米子体系的相干态, 仍可定义为湮没算子的本征态

$$\hat{a}\,|\xi\rangle = \xi\,|\xi\rangle\,. \tag{8.6}$$

但这时的 ξ 不再可能为普通的复数, 而是满足反对易关系的 Grassmann 数

$$\{\xi,\ \bar{\xi}\} = 0, \quad \xi^2 = (\bar{\xi})^2 = 0. \tag{8.7}$$

需要注意比较 (8.7) 式与 (8.2) 式, 区别开费米算子与 Grassmann 数. 费米算子是 Grassmann 数的量子化, 费米子的坐标参数是 Grassmann 数.

Grassmann 变量的微分与积分 这里将介绍的 Grassmann 变量及其微分与积分具有许多新的特点. 由于 Grassmann 变量的幂零性, 其任意函数 $f(\xi,\bar{\xi})$ 的泰勒展开仅有有限项

$$f(\xi,\bar{\xi}) = c_0 + c_1\xi + c_2\bar{\xi} + c_3\bar{\xi}\xi\,, \tag{8.8}$$

其中, c_i 为普通复数. 定义相对 $\xi(\bar{\xi})$ 的导数 $\partial(\bar{\partial})$ 为

$$\partial \equiv \partial/\partial\xi, \quad \bar{\partial} \equiv \partial/\partial\bar{\xi},$$

满足

$$\partial f(\xi,\bar{\xi}) = c_1 - c_3\bar{\xi}, \tag{8.9}$$

$$\bar{\partial} f(\xi,\bar{\xi}) = c_2 + c_3\xi\,. \tag{8.10}$$

运算时应注意反交换 Grassmann 数的秩序, 要将相应变量移至最左边后再取导数去掉.

对于 Grassmann 变量的积分, 为要求对 Grassmann 变量 ξ 的积分在变量 ξ 作常量 η 平移时不变, 即

$$\int \mathrm{d}\xi\xi = \int \mathrm{d}\xi(\xi+\eta) = \int \mathrm{d}\xi\xi + \eta\int \mathrm{d}\xi,$$

则要求

$$\int \mathrm{d}\xi = 0.$$

为此 Berezin 提出如下积分规则:

$$\int \mathrm{d}\bar{\xi}\bar{\xi} = \int \mathrm{d}\xi\xi = 1, \quad \int \mathrm{d}\bar{\xi}1 = \int \mathrm{d}\xi 1 = 0, \tag{8.11}$$

且 $\mathrm{d}\xi$ 与 $\mathrm{d}\bar{\xi}$ 反交换. 按此规则, 对于一般函数 $f(\xi,\bar{\xi})$, 可以证明

$$\int \mathrm{d}\xi f(\xi,\bar{\xi}) = \partial f(\xi,\bar{\xi}), \quad \int \mathrm{d}\bar{\xi} f(\xi,\bar{\xi}) = \bar{\partial} f(\xi,\bar{\xi}). \tag{8.12}$$

如果重新定义变量

$$\xi' = a\xi, \quad a \neq 0,$$

a 为普通常数, 则积分

$$\int \mathrm{d}\xi f(\xi) = \frac{\partial f(\xi)}{\partial \xi} = a\frac{\partial f\left(\frac{\xi'}{a}\right)}{\partial \xi'} = a\int \mathrm{d}\xi' f\left(\frac{\xi'}{a}\right). \tag{8.13}$$

这样可以很容易地将上述定义推广到多个 Grassmann 变量的积分情况, 即如果

$$\xi_i' = a_{ij}\xi_j,$$

这里重复指标求和, 令 $\det(a_{ij}) \neq 0$, 则

$$\int \prod_{i=1}^{n} \mathrm{d}\xi_i f(\xi_i) = \det(a_{ij}) \int \prod_{i=1}^{n} \mathrm{d}\xi_i' f(a_{ij}^{-1}\xi_j'). \tag{8.14}$$

关于 n 维 Grassmann 变量的高斯积分, 有

$$I_n = \int \mathrm{d}\xi_1 \cdots \mathrm{d}\xi_n \mathrm{e}^{-\boldsymbol{\xi}^{\mathrm{T}}\cdot \boldsymbol{A}\cdot \boldsymbol{\xi}} = 2^{\frac{n}{2}}\sqrt{\det \boldsymbol{A}}, \tag{8.15}$$

其中, $\boldsymbol{A} = (A_{ij})$ 为 $n\times n$ 维的反对称矩阵. 例如

$$\begin{aligned} I_2 &= \int \mathrm{d}\xi_1 \mathrm{d}\xi_2 \mathrm{e}^{-\xi_1 A_{12}\xi_2 - \xi_2 A_{21}\xi_1} \\ &= \int \mathrm{d}\xi_1 \mathrm{d}\xi_2 2A_{12}\xi_2\xi_1 = 2A_{12} = 2\sqrt{\det \boldsymbol{A}}, \end{aligned}$$

其中,

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 0 & A_{12} \\ -A_{12} & 0 \end{pmatrix}, \quad \det \boldsymbol{A} = A_{12}^2.$$

又如

$$\begin{aligned} I_4 &= \int \mathrm{d}\xi_1 \cdots \mathrm{d}\xi_4 \mathrm{e}^{-\boldsymbol{\xi}^{\mathrm{T}}\cdot \boldsymbol{A}\cdot \boldsymbol{\xi}} \\ &= \int \mathrm{d}\xi_1 \cdots \mathrm{d}\xi_4 \left(\frac{1}{2!}(\boldsymbol{\xi}^{\mathrm{T}}\cdot \boldsymbol{A}\cdot \boldsymbol{\xi})^2\right) \\ &= \int \mathrm{d}\xi_1 \cdots \mathrm{d}\xi_4 4\xi_1\cdots\xi_4(A_{12}A_{34} - A_{13}A_{24} + A_{14}A_{23}) \\ &= 4Pf(\boldsymbol{A}) = 4\sqrt{\det \boldsymbol{A}}. \end{aligned}$$

与普通多维高斯积分进行比较:

$$\int \mathrm{d}^n \boldsymbol{x} \mathrm{e}^{-\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{x}} = \frac{\pi^{n/2}}{\sqrt{\det \boldsymbol{A}}}, \tag{8.16}$$

其中, $\boldsymbol{A} = (A_{ij})$ 为 $n \times n$ 维的对称矩阵. (8.15) 式与 (8.16) 式在形式上很相似, 可统一记为

$$\int \mathrm{d}^n \boldsymbol{\eta}_{\pm} \mathrm{e}^{-\boldsymbol{\eta}^{\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{\eta}} = (\det \boldsymbol{A})^{\pm \frac{1}{2}}, \tag{8.17}$$

其中 (+) 号相当于 Grassmann 变量积分, 积分测度为

$$\mathrm{d}^n \boldsymbol{\eta}_+ \equiv \prod_1^n \frac{\mathrm{d}\xi_i}{\sqrt{2}}$$

(−) 号相当于普通高斯积分, 积分测度为

$$\mathrm{d}^n \boldsymbol{\eta}_- \equiv \prod_1^n \frac{\mathrm{d}x_i}{\sqrt{\pi}}.$$

费米相干态 有了上述知识的准备, 费米子相干态可以明确地定义为

$$|\xi\rangle = \mathrm{e}^{\hat{a}^+ \xi} |0\rangle = (1 + \hat{a}^+ \xi)|0\rangle = |0\rangle + \hat{a}^+|0\rangle\xi = |0\rangle - \xi |1\rangle . \tag{8.18}$$

它是湮没算子 $\hat{a}$ 的本征态, 即

$$\hat{a} |\xi\rangle = \hat{a}|0\rangle + \hat{a}|1\rangle\xi = \xi |\xi\rangle \ . \tag{8.19}$$

费米相干态集合 $\{|\xi\rangle\}$ 同样满足:

(1) 非正交性

$$\langle\xi| \xi'\rangle = 1 + \bar{\xi}\xi' = \mathrm{e}^{\bar{\xi}\xi'}. \tag{8.20}$$

(2) 过完备性, 但存在单位分解式

$$\begin{aligned} \int \mathrm{d}\mu(\xi) |\xi\rangle \langle\xi| &\equiv \int \mathrm{d}\bar{\xi}\mathrm{d}\xi \mathrm{e}^{-\bar{\xi}\xi} |\xi\rangle \langle\xi| \\ &= \int \mathrm{d}\bar{\xi}\mathrm{d}\xi(1 - \bar{\xi}\xi)(|0\rangle - \xi |1\rangle)(\langle 0| - \langle 1| \bar{\xi}) \\ &= \int \mathrm{d}\bar{\xi}\mathrm{d}\xi[\xi |1\rangle \langle 1| \bar{\xi} - \bar{\xi}\xi |0\rangle \langle 0|] \\ &= |0\rangle \langle 0| + |1\rangle \langle 1| = I. \end{aligned} \tag{8.21}$$

费米体系的 Bargmann 空间 类似于玻色体系的相干态理论, 也可以引入费米体系的 Bargmann 空间. 例如, 对于费米 -Fock 空间中的任意态矢, 如

$$|\psi\rangle = c_0 |0\rangle + c_1 |1\rangle \ , \tag{8.22}$$

可以通过相干态转化为整函数空间中的态矢, 即

$$\langle\xi|\psi\rangle = c_0 + c_1\bar{\xi} \equiv \psi(\bar{\xi}) \ . \tag{8.23}$$

这样算子 $\hat{a}^+$, $\hat{a}$ 对它们的作用可以表为

$$(\hat{a}^+\psi)(\bar{\xi}) = \langle\xi|\,\hat{a}^+\,|\psi\rangle = \sum_{0,1}\langle\xi|\,a^+c_n\,|n\rangle = c_0\,\langle\xi|\,1\rangle = c_0\bar{\xi} = \bar{\xi}\psi(\bar{\xi}) \ , \tag{8.24}$$

和

$$(\hat{a}\psi)(\bar{\xi}) = \langle\xi|\,\hat{a}\,|\psi\rangle = c_1\,\langle\xi|\,0\rangle = c_1 = \bar{\partial}\psi(\bar{\xi}) \ . \tag{8.25}$$

在运算过程中应注意 Grassmann 数之间相互反交换, 且 Grassmann 数与费米产生、湮没算子反交换.

费米算子的表征 Fock 空间中的任意算子 $\hat{A} = \hat{A}(\hat{a}, \hat{a}^+)$ 可表示为

$$\hat{A} = \sum_{0,1}|m\rangle\,A_{mn}\,\langle n| \,, \quad A_{mn} = \langle m|\,\hat{A}\,|n\rangle \,. \tag{8.26}$$

其在相干态下的表征 (symbol)

$$\mathcal{A}(\bar{\xi},\xi') \equiv \langle\xi|\,\hat{A}\,|\xi'\rangle = \sum_{0,1}\bar{\xi}^m A_{mn}{\xi'}^n, \tag{8.27}$$

为算子 $\hat{A}$ 作用于费米 Bargmann 态 $\psi(\bar{\xi})$ 上的积分变换核

$$(\hat{A}\psi)(\bar{\xi}) = \int \mathrm{d}\mu(\xi')\mathcal{A}(\bar{\xi},\xi')\psi(\bar{\xi}'), \tag{8.28}$$

而两算子的乘积为各算子表征的卷积

$$(\hat{A}\hat{B})(\bar{\xi},\xi') = \langle\xi|\,\hat{A}\hat{B}\,|\xi'\rangle = \int \mathrm{d}\mu(\eta)\mathcal{A}(\bar{\xi},\eta)\mathcal{B}(\bar{\eta},\xi'). \tag{8.29}$$

另外, 若算子已排成正规序形式

$$\hat{A} = \sum_{0,1} c_{kl}(\hat{a}^+)^k\hat{a}^l, \tag{8.30}$$

则可以定义算子的正规表征 (symbol)

$$\mathcal{A}^N(\bar{\xi},\xi') = \sum_{0,1} c_{kl}\bar{\xi}^k\xi^l, \tag{8.31}$$

而算子表征与正规表征之间有关系

$$\mathcal{A}(\bar{\xi},\xi') = \mathrm{e}^{\bar{\xi}\xi'}\mathcal{A}^N(\bar{\xi},\xi'). \tag{8.32}$$

费米体系路径积分的相干态表示 现在来分析费米体系的路径积分. 费米相干态的性质与玻色相干态的性质非常相象, 事实上, 可以完全类似地导出时间演化传播函数的费米路径积分的表达式. 例如

$$
\begin{aligned}
&\mathcal{U}(\bar{\xi}_b, \xi_a; t_b, t_a) \\
&= \langle \xi_b | \hat{U}(t_b, t_a) | \xi_a \rangle \\
&= \int_{\xi(t_a)=\xi_a}^{\bar{\xi}(t_b)=\bar{\xi}_b} \mathrm{D}\bar{\xi}(t)\mathrm{D}\xi(t) \exp\left\{ \bar{\xi}_b \xi(t_b) + \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t (\mathrm{i}\hbar\bar{\xi}(t)\dot{\xi}(t) - H(\bar{\xi}(t), \xi(t), t)) \right\} \\
&= \lim_{N\to\infty} \int \prod_{j=1}^{N-1} (\mathrm{d}\bar{\xi}_k \mathrm{d}\xi_k) \exp\left\{ \bar{\xi}_N \xi_N - \sum_{k=1}^{N} \left[\bar{\xi}_k(\xi_k - \xi_{k-1}) + \frac{\mathrm{i}\epsilon}{\hbar} H(\bar{\xi}_k, \xi_{k-1}, t_k) \right] \right\},
\end{aligned} \tag{8.33}
$$

其中, $\bar{\xi}_k, \xi_k$ 为 Grassmann 变量, 满足

$$
\{\xi_k, \xi_l\} = \{\bar{\xi}_k, \bar{\xi}_l\} = \{\bar{\xi}_k, \xi_l\} = 0, \tag{8.34}
$$

而 $\mathcal{H}(\bar{\xi}, \xi, t)$ 由体系哈密顿量写成正规序: $\hat{H}(\hat{a}, \hat{a}^+, t)$: 后, 再作变换将 $\hat{a} \to \xi, \hat{a}^+ \to \bar{\xi}$ 得到.

对于 n 维费米高斯积分, 假设 $(\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_n)$ 和 $(\bar{\xi}_1, \bar{\xi}_2, \cdots, \bar{\xi}_n)$ 是两组相互独立的 Grassmann 变量, 作变量代换

$$
\xi_i' = M_{ij}\xi_j + C_i, \tag{8.35}
$$

这里要求重复指标求和, 或者

$$
\xi_i = M_{ij}^{-1}(\xi_j' - C_j), \tag{8.36}
$$

和

$$
\bar{\xi}_i' = \bar{\xi}_i + C_j^* M_{ji}^{-1} \tag{8.37}
$$

其中, C_i 和 C_i^* 是相互独立的 Grassmann 常数, 于是 n 维费米高斯积分为

$$
\begin{aligned}
I &= \int \prod_{i,j=1}^{N} \mathrm{d}\bar{\xi}_i \mathrm{d}\xi_j \exp\left\{ -\sum_{1}^{N} \bar{\xi}_i M_{ij} \xi_j + \sum_{i=1}^{N} (\bar{\xi}_i C_i + C_i^* \xi_i) \right\} \\
&= \mathcal{N} \det(M_{ij}) \exp\left\{ \sum_{ij} C_i^* M_{ij}^{-1} C_j \right\},
\end{aligned} \tag{8.38}
$$

式中, $\mathcal{N}$ 是一个常数. 在应用中要注意比较上式与玻色高斯积分的不同之处.

8.2 超对称谐振子与超对称量子力学

本节介绍超对称谐振子, 以及经 Witten 推广引入的超对称量子力学模型, 并进一步讨论超对称量子力学中的可精确解问题和可因式化问题等.

超对称谐振子模型 对于一维谐振子 (玻色振子), 其哈密顿量

$$\hat{H}_B = \frac{1}{2}(\hat{p}^2 + \omega^2 \hat{x}^2) = \frac{\omega}{2}(\hat{b}\hat{b}^+ + \hat{b}^+\hat{b}) = \omega\left(\hat{b}^+\hat{b} + \frac{1}{2}\right). \tag{8.39}$$

为简化记号已令 $m=1, \hbar=1$, 且用 $\hat{b}, \hat{b}^+$ 表示玻色湮没及产生算子

$$\hat{b} = \sqrt{\frac{\omega}{2}}\left(\hat{x} + \mathrm{i}\frac{\hat{p}}{\omega}\right), \quad \hat{b}^+ = \sqrt{\frac{\omega}{2}}\left(\hat{x} - \mathrm{i}\frac{\hat{p}}{\omega}\right). \tag{8.40}$$

那么, 由 $[\hat{x}, \hat{p}] = \mathrm{i}$ 得

$$[\hat{b}, \hat{b}^+] = 1. \tag{8.41}$$

对于费米子体系, 其产生和湮没算子 $\hat{a}^+, \hat{a}$ 要满足反对易关系

$$\{\hat{a}, \hat{a}^+\} = 1.$$

设具有频率 ω 的费米振子的哈密顿量

$$\hat{H}_F = \frac{\omega}{2}(\hat{a}^+\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^+) = \omega\left(\hat{a}^+\hat{a} - \frac{1}{2}\right). \tag{8.42}$$

但要注意玻色振子基态的能量为 $\frac{\omega}{2}$, 而对费米振子为 $-\frac{\omega}{2}$.

现在来分析具有相同频率 ω 的玻色-费米振子体系. 处于谐振子势中的玻色-费米子体系, 其态矢需用两分量波函数描述, 在坐标表象下为

$$\boldsymbol{\psi}(x) = \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix} \in \mathcal{L}^2(\boldsymbol{R}) \otimes \boldsymbol{C}_2 \tag{8.43}$$

玻色-费米振子体系的哈密顿量 (称为超对称谐振子) 为

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_B + \hat{H}_F = \omega\left(\hat{b}^+\hat{b} + \frac{1}{2}\right) \otimes I + \frac{\omega}{2}(\hat{a}^+\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^+) \\ &= \frac{1}{2}(\hat{p}^2 + \omega^2\hat{x}^2) \otimes I - \frac{\omega}{2}\sigma_3 \\ &= \frac{1}{2}\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \omega^2\hat{x}^2\right) \otimes I - \frac{\omega}{2}\sigma_3 \\ &= \omega(\hat{N} + \hat{\nu}), \end{aligned} \tag{8.44}$$

其中, $\hat{N}=\hat{b}^+\hat{b}$, $\hat{\nu}=\hat{a}^+\hat{a}$ 分别为玻色、费米粒子数算子, 即

$$\hat{N}=\hat{b}^+\hat{b}, \quad \hat{N}\left|n_b\right\rangle = n_b\left|n_b\right\rangle, \quad n_b=0,1,2\cdots, \tag{8.45}$$

$$\hat{\nu}=\hat{a}^+\hat{a}, \quad \hat{\nu}\left|n_f\right\rangle = n_f\left|n_f\right\rangle, \quad n_f=0,1. \tag{8.46}$$

超对称谐振子 (8.44) 式的本征值 E_{n_b,n_f} 与本征态 $|n_b,n_f\rangle$ 满足

$$\hat{H}\left|n_b,n_f\right\rangle = E_{n_b,n_f}\left|n_b,n_f\right\rangle = \omega(n_b+n_f)\left|n_b,n_f\right\rangle, \tag{8.47}$$

其中, 基态 $|0\rangle$ 满足

$$\hat{b}\left|0\right\rangle = 0 = \hat{a}\left|0\right\rangle. \tag{8.48}$$

基态能量为零是体系具有超对称性的特点. 而且由 (8.48) 式看出, 除基态外, 体系其他状态的能级都是双重简并的, 即当 $n_b\neq 0, |n_b,1\rangle$ 与 $|n_b+1,0\rangle$ 具有相同的能量 $\omega(n_b+1)$, 如图 8.1 所示.

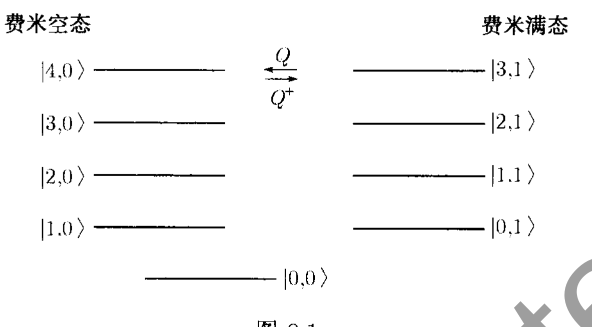


图 8.1

超荷与超李代数 引入两个超荷算子

$$\hat{Q}=\hat{b}^+\hat{a}, \quad \hat{Q}^+=\hat{a}^+\hat{b} \tag{8.49}$$

易证

$$\begin{aligned}[\hat{Q},\hat{H}] &= [\hat{b}^+\hat{a}, \omega(\hat{b}^+\hat{b}+\hat{a}^+\hat{a})] \\ &= \omega(\hat{b}^+[\hat{b}^+,\hat{b}]\hat{a}+\hat{b}^+\{\hat{a},\hat{a}^+\}\hat{a}) \\ &= \omega(-\hat{b}^+\hat{a}+\hat{b}^+\hat{a}) = 0,\end{aligned} \tag{8.50}$$

类似地, 可得

$$[\hat{Q}^+,\hat{H}] = 0, \tag{8.51}$$

即算子 $\hat{Q},\hat{Q}^+$ 均是体系的守恒量. 实际上, 它们是体系超对称变换的生成元, 且具有幂零性

$$\hat{Q}^2 = 0 = (\hat{Q}^+)^2. \tag{8.52}$$

另外, 超荷算子还满足

$$\begin{aligned}\{\hat{Q},\hat{Q}^+\} &= \{\hat{b}^+\hat{a},\hat{a}^+\hat{b}\} = \hat{b}^+\{\hat{a},\hat{a}^+\}\hat{b} - \hat{a}^+[\hat{b}^+,\hat{b}]\hat{a}\\ &= \hat{b}^+\hat{b} + \hat{a}^+\hat{a} = \frac{\hat{H}}{\omega}.\end{aligned} \tag{8.53}$$

且由 (8.49) 式 ~(8.51) 式知, 基态 $|0\rangle$ 满足

$$\hat{Q}\,|0\rangle = 0 = \hat{Q}^+\,|0\rangle\,, \tag{8.54}$$

基态能量

$$\langle 0|\,\hat{H}\,|0\rangle = \langle 0|\,\hat{Q}\hat{Q}^+ + \hat{Q}^+\hat{Q}\,|0\rangle = 0, \tag{8.55}$$

即在超对称理论中超对称谐振子的基态能量为零, 且 $\hat{H}$ 为自伴算子, 其本征值为半正定的.

超对称谐振子体系的守恒量集合 $\{\hat{H},\hat{Q},\hat{Q}^+\}$ 形成封闭的超李代数 $SL(1,1)$:

$$\begin{aligned}&[\hat{H},\hat{Q}] = 0, \quad [\hat{H},\hat{Q}^+] = 0,\\ &\{\hat{Q},\hat{Q}^+\} = \frac{\hat{H}}{\omega}, \quad \{\hat{Q},\hat{Q}\} = 0 = \{\hat{Q}^+,\hat{Q}^+\}.\end{aligned}$$

在超对称理论的发展中, 超对称谐振子是最简单的例子[1].

现在, 研究量子力学中具有超对称的典型问题: 电荷为 e, 具有自旋 $\frac{1}{2}$ 的粒子在外磁场中运动的情况.

由于自旋无经典对应, 所以需要考虑相对论效应. 狄拉克建议考虑电子自旋自由度后, 需要引入多分量波函数, 并提出了相对论波动方程.

自由粒子的狄拉克方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{\Psi} = c(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p} + \boldsymbol{\beta}mc)\boldsymbol{\Psi}, \tag{8.56}$$

其中, $\boldsymbol{\Psi}$ 为 4 分量波函数, $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}$ 均为 4×4 维矩阵

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma}\\ \boldsymbol{\sigma} & 0\end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} I & 0\\ 0 & -I\end{pmatrix}. \tag{8.57}$$

在外电磁场中, 按最小耦合原理, 相当于作代换

$$\boldsymbol{p} \to \boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}, \quad \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} \to \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\phi,$$

得运动方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{\Psi} = \left\{c\boldsymbol{\alpha}\cdot\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right) + \beta mc^2 + e\phi\right\}\Psi. \tag{8.58}$$

---

① Nicolai. 1976. Susy and spin system. J. Phys. A. Math. Gen., (9): 1497~1506.

作非相对论近似 ($c\to\infty$) 时, 粒子静能是总能量中主要部分. 取波函数

$$\boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{x},t)=\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}mc^2t}\begin{pmatrix}\psi\\ \chi\end{pmatrix},$$

其中, $\psi(\boldsymbol{x},t)$ 和 $\chi(\boldsymbol{x},t)$ 均为两分量波函数, 且随时间缓慢变化. 这样, 在非相对论近似 $\left(\frac{v}{c}=\epsilon\right)$ 下, 有

$$\chi=\frac{1}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\psi,$$

其中 χ 为小分量, 而大分量 ψ 满足泡利二分量方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=\left\{\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+\mathrm{e}\phi-\frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}\right\}\psi=H\psi.$$

与通常带电粒子 (无自旋) 在电磁场中运动的薛定谔方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=\left\{\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+e\phi\right\}\psi$$

比较后发现, 正是由于粒子具有自旋 $S=\frac{\hbar}{2}\sigma$, 所以粒子具有内禀磁矩

$$\mu_B=g\frac{e}{2mc}S=g\frac{e\hbar}{4mc}\sigma\ ,$$

其中, g 为旋磁比.

对于稳定磁场,

$$\boldsymbol{B}=\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A},\quad\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t}=0,\quad\phi=0,$$

则体系的哈密顿量

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2-g\frac{e\hbar}{4mc}\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{\sigma}.$$

当取旋磁比 $g=2$, 粒子的内禀磁矩为

$$\mu_B=\frac{e\hbar}{2mc}\sigma.$$

易证上述体系中存在守恒电荷

$$Q=\frac{1}{\sqrt{4m}}\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\cdot\boldsymbol{\sigma},$$

并满足

$$[Q,\hat{H}]=0,\quad\{Q,Q\}=\hat{H},$$

这说明体系存在超对称性. 事实上, 设 $|\psi_E\rangle$ 为 $\hat{H}$ 的本征值 $E>0$ 的本征态, 即

$$\hat{H}|\psi_E\rangle = E|\psi_E\rangle, \quad E>0.$$

可以证明 $|\psi'_E\rangle = \sqrt{\frac{2}{E}}Q|\psi_E\rangle$ 也为 $\hat{H}$ 具有相同本征值 E 的本征态, 换言之, 所有正能态均二重简并. 电子磁矩实验测量值 $\mu = 1.00116\mu_B$, 它与 μ_B 的差别基本符合超对称约束的要求.

超对称量子力学 量子力学中精确可解的问题常与哈密顿量可因式化, 即存在超对称结构有关. 以一维定态问题为例, 本征值方程为

$$\hat{\boldsymbol{H}}\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\right)\psi = E\psi. \tag{8.59}$$

当 $V(x)$ 为精确可解势, 则哈密顿量 $\hat{H}$ 为厄米算子, 常可将 (8.59) 式化为两个一阶微分算子的乘积

$$\hat{\boldsymbol{H}} = \hat{\boldsymbol{A}}^+\hat{\boldsymbol{A}},$$

而

$$\hat{\boldsymbol{A}} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + W(x), \quad \hat{\boldsymbol{A}}^+ = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + W(x). \tag{8.60}$$

其中, $W(x)$ 为实函数, 称为超势. 而哈密顿量

$$\hat{\boldsymbol{H}} = \hat{\boldsymbol{A}}^+\hat{\boldsymbol{A}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + W^2(x) - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}W'(x).$$

势能

$$V(x) = W^2(x) - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}W'(x). \tag{8.61}$$

若势 $V(x)$ 为可解势, 则能由 (8.61) 式解出超势 $W(x)$. (8.61) 式为超势 $W(x)$ 应满足的一阶非线性微分方程, 称为 Riccati 方程.

可解势与束缚基态波函数 $\psi_0(x)$ 密切相关. 为讨论方便, 设基态能级为零, 则有

$$\hat{\boldsymbol{H}}\psi_0(x) = \hat{\boldsymbol{A}}^+\hat{\boldsymbol{A}}\psi_0(x) = 0, \quad \hat{\boldsymbol{A}}\psi_0(x) = 0,$$

由此解得超势

$$W(x) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\frac{\psi_0'(x)}{\psi_0(x)}, \quad V(x) = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi_0''(x)}{\psi_0(x)}. \tag{8.62}$$

若基态波函数无节点, 则 (8.62) 式整体有意义, 这时称哈密顿量可因式化.

利用因式化超势 $W(x)$, 可以组成另一体系, 称为 $\hat{\boldsymbol{H}}$ 的超伙伴

$$\hat{\boldsymbol{H}}^{(1)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + W^2(x) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}W'(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + U(x). \tag{8.63}$$

再将 $\hat{\boldsymbol{H}}$ 及其超伙伴 $\hat{\boldsymbol{H}}^{(1)}$ 联合, 可以组成具有超对称结构的量子力学体系

$$\hat{\boldsymbol{H}}_s=\begin{pmatrix}\hat{\boldsymbol{H}} & 0\\ 0 & \hat{\boldsymbol{H}}^{(1)}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\hat{\boldsymbol{A}}^+\hat{\boldsymbol{A}} & 0\\ 0 & \hat{\boldsymbol{A}}\hat{\boldsymbol{A}}^+\end{pmatrix} \tag{8.64}$$

$$=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+W^2(x)\right)\otimes\boldsymbol{I}-\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}W'(x)\sigma_3. \tag{8.65}$$

引入超荷算子

$$\boldsymbol{Q}=\hat{\boldsymbol{A}}\otimes\boldsymbol{\sigma}_-=\begin{pmatrix}0 & 0\\ \hat{\boldsymbol{A}} & 0\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{Q}^+=\hat{\boldsymbol{A}}^+\otimes\boldsymbol{\sigma}_+=\begin{pmatrix}0 & \hat{\boldsymbol{A}}^+\\ 0 & 0\end{pmatrix}. \tag{8.66}$$

易证, 它们均为与 $\hat{H}_s$ 对易的守恒超荷算子

$$[\boldsymbol{Q},\hat{\boldsymbol{H}}_s]=0,\quad [\boldsymbol{Q}^+,\hat{\boldsymbol{H}}_s]=0,$$
$$\{\boldsymbol{Q},\boldsymbol{Q}^+\}=\hat{\boldsymbol{H}}_s,\quad \{\boldsymbol{Q},\boldsymbol{Q}\}=\{\boldsymbol{Q}^+,\boldsymbol{Q}^+\}=0.$$

即 $\{\hat{\boldsymbol{H}}_s,\boldsymbol{Q},\boldsymbol{Q}^+\}$ 组成超李代数, 称为体系的超对称李代数.

上述量子力学可解模型, 正是 1981 年 Witten 提出的超对称量子力学模型. 当超势 $W(x)$ 为坐标线性势, 则 $\hat{H}_s$ 正好是前面分析的超对称谐振子模型. 所以 Witten 模型正是超对称谐振子模型的推广①.

超对称变换与能级简并 量子力学中, 定态哈密顿量本征值问题的精确求解一般是困难问题, 而超对称可以帮助精确求解. 一般来讲, 当 $\hat{H}$ 有下界且有离散的本征值谱, 能量本征态可用整数标记, 在此基底上可以形式地引入升降阶梯算子, 之后再利用超对称量子力学得到具体的阶梯算子. 这样一来, 整个问题的关键是寻找势与束缚态波函数之间的联系. 下面来更加仔细地分析 $\hat{H}$ 及其超伙伴 $\hat{H}^1$ 间能级简并的特点. 为符号简化, 将超 $\hat{H}$ 及其超伙伴 $\hat{H}^1$ 记为

$$\hat{\boldsymbol{H}}_1=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V_1(x),\quad V_1(x)=W^2(x)-\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}W'(x),$$
$$\hat{\boldsymbol{H}}_2=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V_2(x),\quad V_2(x)=W^2(x)+\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}W'(x).$$

选 $\hat{H}_1$ 的基态能量为零, 由

$$\hat{\boldsymbol{H}}_1\psi_0=\hat{\boldsymbol{A}}^+\hat{\boldsymbol{A}}\psi_0=0,$$

得

$$\hat{\boldsymbol{A}}\psi_0=0.$$

① Witten E. 1981. Nucl. Phys. B, (188): 513~554.

由此解得 $\psi_0(x)$ 无节点, 并且

$$W(x) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\frac{\psi_0'(x)}{\psi_0(x)}, \quad V_1(x) = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi''_0(x)}{\psi_0(x)}. \tag{8.67}$$

当 $n>0$, 设 $\psi_n^{(1)}$ 为 H_1 的激发态, 满足

$$\hat{\boldsymbol{H}}_1\psi_n^{(1)} = \hat{\boldsymbol{A}}^+\hat{\boldsymbol{A}}\psi_n^{(1)} = E_n^{(1)}\psi_n^{(1)}, \tag{8.68}$$

则易证 $\hat{\boldsymbol{A}}\psi_n^{(1)}$ 为 $\hat{\boldsymbol{H}}_2$ 的本征值为 $E_n^{(1)}$ 的本征态, 即

$$\hat{\boldsymbol{H}}_2(\hat{\boldsymbol{A}}\psi_n^{(1)}) = \hat{\boldsymbol{A}}\hat{\boldsymbol{A}}^+\hat{\boldsymbol{A}}\psi_n^{(1)} = E_n^{(1)}(\hat{\boldsymbol{A}}\psi_n^{(1)}). \tag{8.69}$$

类似地, 对于 $\hat{\boldsymbol{H}}_2$ 的本征态 $\psi_n^{(2)}$

$$\hat{\boldsymbol{H}}_2\psi_n^{(2)} = \hat{\boldsymbol{A}}\hat{\boldsymbol{A}}^+\psi_n^{(2)} = E_n^{(2)}\psi_n^{(2)}, \tag{8.70}$$

同样有

$$\hat{\boldsymbol{H}}_1(\hat{\boldsymbol{A}}^+\psi_n^{(2)}) = \hat{\boldsymbol{A}}^+\hat{\boldsymbol{A}}\hat{\boldsymbol{A}}^+\psi_n^{(2)} = E_n^{(2)}(\hat{\boldsymbol{A}}^+\psi_n^{(2)}), \tag{8.71}$$

所以

$$E_0^{(1)} = 0, \quad E_n^{(1)} = E_{n-1}^{(2)}, \quad n=1,2,\cdots. \tag{8.72}$$

即除基态外, 两超伙伴 $\hat{\boldsymbol{H}}_1$ 与 $\hat{\boldsymbol{H}}_2$ 的谱完全相同, 而且本征态间存在超对称变换 (利用算子 $\hat{\boldsymbol{A}}$, $\hat{\boldsymbol{A}}^+$ 可如 (8.66) 组成超荷算子并形成超李代数)

$$\psi_n^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{E_{n+1}^{(1)}}}\hat{\boldsymbol{A}}\psi_{n+1}^{(1)}, \quad \psi_{n+1}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{E_n^{(2)}}}\hat{\boldsymbol{A}}^+\psi_n^{(2)}, \tag{8.73}$$

即算子 $\hat{\boldsymbol{A}}$ 使 $\hat{\boldsymbol{H}}_1$ 的本征态跃至 $\hat{\boldsymbol{H}}_2$ 本征态, 具有相同本征值, 少一节点; 而算子 $\hat{\boldsymbol{A}}^+$ 使 $\hat{\boldsymbol{H}}_2$ 的本征态跃至 $\hat{\boldsymbol{H}}_1$ 的本征态, 具有相同本征值, 但多一节点. 各能态中, 仅 $E_0^{(1)}$ 不简并, 其余能级二重简并, 如图 8.2 所示.

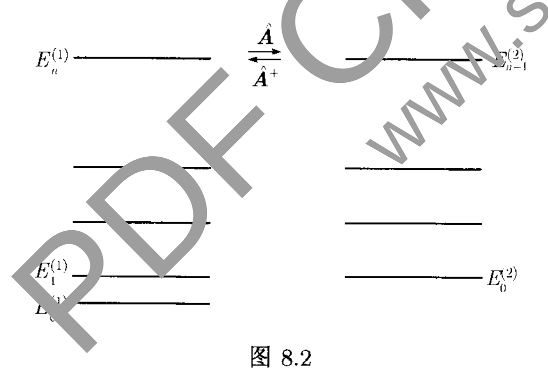


图 8.2

8.3 氢原子的能谱及波函数

作为超对称量子力学理论的应用举例, 再来研究一下氢原子问题. 氢原子的定态本征值问题为

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\Delta}-\frac{e^2}{r}\right)\psi(\boldsymbol{r})=E\psi(\boldsymbol{r}). \tag{8.74}$$

其中, 束缚态 $\psi(\boldsymbol{r})$ 为 $\hat{H},\hat{L}^2,\hat{L}_z$ 的共同本征态 (暂不分析其精细结构, 忽略自旋). 取球坐标, 选氢原子束缚态波函数为

$$\psi(r,\theta,\varphi)=\frac{1}{r}R_{n'l}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi), \tag{8.75}$$

其中, 径向部分 $R_{n'l}(r)$ 在原点处为零, 满足方程

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}-\frac{e^2}{r}+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right)R_{n'l}(r)=E_{n'l}R_{n'l}(r). \tag{8.76}$$

引入量纲为一参数

$$\rho=\frac{r}{a},\quad \left(a=\frac{\hbar^2}{me^2}=0.529\times10^{-8}\mathrm{cm}\right), \tag{8.77}$$

$$\varepsilon_{n'l}=\frac{E_{n'l}}{e^2/2a},\quad \left(\frac{e^2}{2a}=13.5\mathrm{eV}\right), \tag{8.78}$$

则 (8.78) 式记为

$$\left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}-\frac{2}{\rho}+\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)u_{n'l}(\rho)=\varepsilon_{n'l}u_{n'l}(\rho). \tag{8.79}$$

(8.79) 式中的哈密顿量可因子化为

$$\hat{\boldsymbol{H}}^{(l)}=-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}-\frac{2}{\rho}+\frac{l(l+1)}{\rho^2}=\hat{\boldsymbol{A}}_l^+\hat{\boldsymbol{A}}_l-\frac{1}{(l+1)^2}, \tag{8.80}$$

其中,

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{A}}_l&=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}-\frac{l+1}{\rho}+\frac{1}{l+1},\\ \hat{\boldsymbol{A}}_l^+&=-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}-\frac{l+1}{\rho}+\frac{1}{l+1}.\end{aligned} \tag{8.81}$$

阶梯算子 $\hat{\boldsymbol{A}}_l$, $\hat{\boldsymbol{A}}_l^+$ 在 $\hat{\boldsymbol{H}}^{(l)}$ 及其超伙伴 $\hat{\boldsymbol{H}}^{(l+1)}$ 的各本征态的相同能级的状态间跃迁, 如图 8.3 所示. l 称为角量子数, n' 称为径向量子数, 标记着径向波函数

$R_{n'l}(r)$ 的节点数. $\hat{\boldsymbol{H}}^{(l)}$ 的各本征态中的最低态是 $n'=0$ 的态, 其径向波函数 $R_{0l}(r)$ 没有节点. 由于各算子 $\hat{\boldsymbol{A}}_l(\hat{\boldsymbol{A}}_l^+)$ 的作用, 氢原子的能谱对于不同角动量的态间存在简并, 即

$$\varepsilon_{n'}^{l}=\varepsilon_{n'+1}^{l-1}=\cdots=\varepsilon_{n'+l}^{1}=\varepsilon_{n'+l+1}^{0}, \tag{8.82}$$

$1/5^2$ $n'=4$ 5s $n'=3$ 5p $n'=2$ 5d $n'=1$ 5f $n'=0$ $\boldsymbol{A}_l$ / $\boldsymbol{A}_l^+$

$1/4^2$ 4s 4p 4d 4f

$1/3^2$ 3s 3p $n'=0$ 3d $n'=0$

$1/2^2$ 2s $n'=0$ 2p

1 $n'=0$ 1s

$H^{(0)}$ $H^{(1)}$ $H^{(2)}$ $H^{(3)}$ $H^{(4)}$

图 8.3

在各简并能态中, 与 $l_{\max}$ 相应的本征态 $u_{l_{\max}}$ 满足

$$\hat{A}_{l_{\max}}u_{l_{\max}}=0. \tag{8.83}$$

由 (8.81) 式知

$$E_{l_{\max}}=-\frac{1}{(l_{\max}+1)^2}.$$

令 $n=l_{\max}+1=n'+l+1$, 称为主量子数, 即

$$\varepsilon_n=-\frac{1}{n^2}. \tag{8.84}$$

记 $u_{n'l}(\rho)\equiv u_{n'}^{(l)}$, $u_{l_{\max}}=u_0^{(l)}$, 由 (8.83) 式得

$$\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}-\frac{l+1}{\rho}+\frac{1}{l+1}\right)u_0^{(l)}=0, \tag{8.85}$$

因此

$$u_0^{(l)}\sim\rho^{l+1}\mathrm{e}^{-\frac{\rho}{l+1}}. \tag{8.86}$$

显然, 不同角动量 (l) 的"径向基态" $u_0^{(l)}$ 在 $(0,\infty)$ 间无节点. 进一步通过各算子 $\hat{\boldsymbol{A}}_l^+$ 的作用可得径向 $(n'>0)$ 相应的本征波函数, 如表 8.1 所示.

表 8.1

n	态	$n'=0$	态	$n'=1$	态	$n'=2$
1	1s	$U_0^{(0)}\sim\rho\mathrm{e}^{-\rho}$				
2	2p	$U_0^{(1)}\sim\rho^2\mathrm{e}^{-\rho/2}$	2s	$U_1^{(0)}=A_0^+U_0^{(1)}$		
3	3d	$U_0^{(2)}\sim\rho^3\mathrm{e}^{-\rho/3}$	3p	$U_1^{(1)}=A_1^+U_0^{(2)}$	3s	$U_2^{(0)}=A_0^+A_1^+U_0^{(2)}$

表 8.1 中:

$$\begin{aligned}
&\text{2s态}\quad u_1^{(0)}\sim\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}-\frac{1}{\rho}+1\right)\rho^3\mathrm{e}^{-\rho/3}=-5\rho^2\left(1-\frac{1}{6}\rho\right)\mathrm{e}^{-\rho/3},\\
&\text{3p态}\quad u_1^{(1)}\sim\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}-\frac{2}{\rho}+1\right)\rho^2\mathrm{e}^{-\rho/2}=-3\rho\left(1-\frac{1}{2}\rho\right)\mathrm{e}^{-\rho/2},\\
&\text{3s态}\quad u_2^{(0)}\sim-3\rho\left(1-\frac{2}{3}\rho+\frac{2}{27}\rho^2\right)\mathrm{e}^{-\rho/3}.
\end{aligned}\tag{8.87}$$

上述结果除归一化因子外, 与氢原子的精确解完全符合[1]. 至此已经看出, 在超对称量子力学框架下, 氢原子是精确可解的, 而且当已知其基态能量及相应基态波函数, 则整个束缚态信息可以全部得到.

8.4　路径积分与超对称量子力学

超对称量子力学体系的路径积分　8.3 节介绍了 $N=2$ 超对称量子力学 (有两个超荷算子) 的哈密顿形式, 本节介绍其拉格朗日形式, 以及相关的路径积分.

超对称量子力学哈密顿量的一般形式为 (为简化问题已取 $\hbar=1=m$, 且对超势 W 重新标度)

$$H=\frac{1}{2}p^2+\frac{1}{2}W(x)^2+\frac{1}{2}W'(x)[a^+,a]\tag{8.88}$$

与其相关的"配分函数"的路径积分表达式为

$$\begin{aligned}
Z(T)=&\ \mathrm{tr}(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}T})\\
=&\int_{x(T)=x(0)}\mathrm{D}x(t)\int_{\xi(T)\bar{\xi}(T)=\xi(0)\xi(0)}\mathrm{D}\xi(t)\mathrm{D}\bar{\xi}(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\int_0^T\mathrm{d}tL(x,\dot{x};\xi,\bar{\xi})},
\end{aligned}\tag{8.89}$$

其中,

$$L=\frac{1}{2}\dot{x}-\frac{1}{2}W^2(x)+\mathrm{i}\bar{\xi}\dot{\xi}-W'(x)\bar{\xi}\xi\tag{8.90}$$

为超对称量子力学体系的拉氏量的一般形式, 并假定势不显含时间, 为定态, 能量下有界. 粒子在磁场 $B(x)=W'(x)$ 中运动时, 存在自旋磁矩与磁场之间的相互作用 (含 $\hbar$).

① 曾谨言. 2001. 量子力学卷 I. 北京: 科学出版社, 330.

以下重点计算费米子部分的路径积分 (含 $\hbar$ 展开, 相当于准经典近似渐近级数展开). 此时 L 相对费米场是双线性的, 且已用“经典”Grassmann 变量 $\bar{\xi},\xi$ 代替了 $\frac{1}{2}[\hat{a}^+,\hat{a}]$, 这样, 相应路径积分等价于计算积分核的行列式

$$\int \mathrm{D}\xi(t)\int \mathrm{D}\bar{\xi}(t)\exp\left[\mathrm{i}\int_{t_a}^{t_b}\bar{\xi}\left(\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}-W'(x)\right)\xi\mathrm{d}t\right]\equiv\det\left(\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}-W'(x(t))\right). \tag{8.91}$$

此式的确定依赖于在适当边界条件下的本征值问题.

作 Wick 转动 $t\to \mathrm{i}\tau$, 将计算转换成欧氏空间路径积分, 记为

$$Z_E=\int \mathrm{D}x(\tau)\mathrm{D}\xi(\tau)\mathrm{D}\bar{\xi}(\tau)\mathrm{e}^{-S_E}, \tag{8.92}$$

其中,

$$S_E=\int_0^\beta \mathrm{d}\tau\left[\frac{1}{2}\dot{x}^2+\frac{1}{2}W^2(x)-\bar{\xi}(\partial_\tau-W'(x)\xi)\right],\quad \dot{x}=\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}\tau}. \tag{8.93}$$

因为 $\hat{H}$ 下有界, 欧氏空间路径积分必然收敛. 不难证明, 作用量 (8.93) 式在下面的超对称变换下不变:

$$\delta x=\bar{\epsilon}\xi+\bar{\xi}\epsilon,\quad \delta\bar{\xi}=-\bar{\epsilon}(\partial_\tau x+W(x)),\quad \delta\xi=-\epsilon(-\partial_\tau x+W(x)), \tag{8.94}$$

其中, ϵ, $\bar{\epsilon}$ 为两个无穷小反交换参数. 此变换混合了玻色子与费米子的自由度, 是 $N=2$ 的超对称变换.

现在来计算费米部分的路径积分, 这相当于因为自旋引起能级分裂的部分:

$$\int \mathrm{D}\xi\mathrm{D}\bar{\xi}\exp\int_0^\beta \mathrm{d}\tau\bar{\xi}(\partial_\tau-W'(x))\xi. \tag{8.95}$$

对于边界条件

$$\bar{\xi}(\beta)\xi(\beta)=\bar{\xi}(0)\xi(0)$$

可以采用周期性边界条件, 即

$$\xi(\beta)=\xi(0),\quad \bar{\xi}(\beta)=\bar{\xi}(0), \tag{8.96}$$

或用反周期性边界条件

$$\xi(\beta)=-\xi(0),\quad \bar{\xi}(\beta)=-\bar{\xi}(0). \tag{8.97}$$

用算子 $(\partial_\tau-W')$ 的本征矢求算子行列式

$$\det(\partial_\tau-W'(x))=\prod_m\lambda_m, \tag{8.98}$$

其中

$$(\partial_\tau - W'(x))\xi_m = \lambda_m \xi_m. \tag{8.99}$$

所以,

$$\begin{aligned}\frac{\partial_\tau \xi_m}{\xi_m} &= \lambda_m + W'(x(\tau)),\\ \xi_m(\beta) &= c_m \exp\left[\int_0^\beta \mathrm{d}\tau(\lambda_m + W'(x))\right]\\ &= c_m \exp\left[\lambda_m\beta + \int_0^\beta \mathrm{d}\tau W'(x(\tau))\right].\end{aligned}$$

当取反周期边界条件

$$\xi_m(\beta) = -\xi_m(0) \tag{8.100}$$

得

$$\begin{aligned}\lambda_m &= \mathrm{i}\frac{(2m+1)\pi}{\beta} - \frac{1}{\beta}\int_0^\beta \mathrm{d}\tau W'(x)\\ &= \mathrm{i}\frac{(2m+1)\pi}{\beta}\left(1 + \mathrm{i}\frac{2\alpha}{(2m+1)\pi}\right), \quad 2\alpha = \int_0^\beta \mathrm{d}\tau W'(x).\end{aligned} \tag{8.101}$$

在 $W'(x) = 0$ 时对行列式正则化, 以及利用无穷乘积展式①:

$$\cosh\alpha = \prod_{m=1}^{\infty}\left(1 + \frac{4\alpha^2}{(2m+1)^2\pi^2}\right), \tag{8.102}$$

得

$$\det\left(\frac{\partial_\tau - W'(x)}{\partial_\tau}\right) = \cosh\left(\int_0^\beta \mathrm{d}\tau \frac{W'(x)}{2}\right). \tag{8.103}$$

将 cosh 项写为两个指数项之和, 则

$$Z_E = \mathrm{tr}\mathrm{e}^{-H_1\beta} + \mathrm{tr}\mathrm{e}^{-H_2\beta} = Z_E^- + Z_E^+. \tag{8.104}$$

其中,

$$Z_E^\pm = \int \mathrm{D}x(\tau)\mathrm{e}^{-S_E^\pm}, \tag{8.105}$$

$$S_E^\pm = \int_0^\beta \mathrm{d}\tau\left(\frac{\dot{x}^2}{2} + \frac{W^2(x)}{2} \pm \frac{W'(x)}{2}\right). \tag{8.106}$$

① Gradshteyn I S, Ryzhik I M. 1980. Table of Integrals, Series and Products. New York: Academic Press, 37.

Witten 指数与超对称破缺　在分析超对称是否破缺时, Witten 引入一指数 (称为 Witten 指数)

$$\boldsymbol{\Delta}(\beta)=\mathrm{tr}(-1)^F\mathrm{e}^{-\beta H},$$

并来标记场的拓扑特性. 这时对费米子取周期性边界条件, 即将 (8.100) 式换为

$$\xi_m(\beta)=\xi_m(0), \tag{8.107}$$

则 (8.101) 式相应地变为

$$\lambda_m=\mathrm{i}\frac{2m\pi}{\beta}-\frac{1}{\beta}\int_0^\beta \mathrm{d}\tau W'(x). \tag{8.108}$$

利用无穷乘积展式

$$\sinh\alpha=\alpha\prod_{m=1}^{\infty}\left(1+\frac{\alpha^2}{n^2\pi^2}\right), \tag{8.109}$$

可得在周期性边界条件下

$$\det\left[\frac{\partial_\tau-W'(x)}{\partial_\tau}\right]=\sinh\left(\int_0^\beta \mathrm{d}\tau W'(x)\right). \tag{8.110}$$

将 sinh 项写为两个指数项之差, 于是得到正则 Witten 指数:

$$\boldsymbol{\Delta}(\beta)=\mathrm{tr}\mathrm{e}^{-\beta H_1}-\mathrm{tr}\mathrm{e}^{-\beta H_2}=Z_E^- - Z_E^+. \tag{8.111}$$

当体系具有超对称性, Q 与 Q^+ 均湮没真空态 (基态), 又因为

$$H=\{Q,Q^+\},$$

故基态能量必须为零. 因此, 当存在超对称, 除 H 的基态 $E=0$ 非简并外, 其余能级均双重简并. 这时 Witten 指数

$$\boldsymbol{\Delta}(\beta)=\mathrm{tr}(-1)^F\mathrm{e}^{-\beta H}=1.$$

超对称破缺与否, 与是否存在可归一的基态波函数有紧密的联系. 例如, 基态波函数

$$\psi_0(x)=N\mathrm{e}^{-\int W(x)\mathrm{d}x}. \tag{8.112}$$

当 $x\to\pm\infty$ 时, $W(x)$ 具有相反符号, 且在 $\pm\infty$ 处衰减足够快, 这时的超对称未破缺, $\boldsymbol{\Delta}(\beta)=1$. 否则基态能量非零, 超对称已破缺.

习　题　8

1. 请证明 (8.38) 式, 并将它与 n 维玻色子积分比较, 区别其异同.
2. 请证明 (8.93) 式作用量具有 $N=2$ 超对称性.

第 9 章　量子可积与不可积性

9.1　一维定态薛定谔方程的正反散射问题

在量子力学问题中, 关于一维运动问题的分析研究占有很重要的地位. 一方面, 它比较简单, 易于分析与讨论, 而且它是处理一些复杂问题的基础; 另一方面, 对于三维空间中的运动, 经过对称性分析及分离变量, 也常常可以化为一维问题来处理. 当然, 单粒子的一维运动常常有些与高维运动不同的特点. 例如, 对于单粒子的经典运动, 一维束缚运动必为周期运动, 一维散射时粒子必穿过散射中心, 等等. 这些特点, 在分析高维运动时, 还应特别注意.

在初等量子力学中, 我们对一维问题已很熟悉, 这里仅简单地总结一下有关理论的一般特点. 本节将先着重分析一维定态的正散射问题, 最后分析其反散射问题.

一维定态问题　定态薛定谔方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+U(x)\right]\psi(x)=E\psi\ . \tag{9.1}$$

采用记号

$$U(x)=\frac{\hbar^2}{2m}V(x)\ ,\quad E=\frac{\hbar^2}{2m}\epsilon\ , \tag{9.2}$$

可将 (9.1) 式重新写为

$$\psi''+[\epsilon-V(x)]\psi=0\ . \tag{9.3}$$

这是二阶常微分方程 (Sturm-Liouville 型), 其中 $V(x)$ 为实函数, 且有下界, 在整个区间 $(-\infty,+\infty)$ 上分段连续. 我们的目的是寻找该方程在整个区间上的单值、连续、可微的解.

由于 (9.3) 式为线性方程, 如果找到其一个解, 则此解乘上任意常数仍为其解, 这时由于解还没有归一化, 所以解乘以任意常数认为仍为同一解. 如果找到两个线性独立的解, 则其线性组合仍为方程的解. 而线性独立本征解的数目就是该本征值 ϵ 的简并度. 对于二阶常微分方程 (9.3) 式, 其通解可以有两个任意常数, 故能量本征值 ϵ 的最高简并度为 2.

假定已经找到方程的两个解 ψ_1 与 ψ_2, 为判断它们是否线性相关, 可利用此两解的 Wronskian 行列式:

$$W(\psi_1,\psi_2)=\psi_1\psi_2'-\psi_2\psi_1'=\begin{vmatrix}\psi_1 & \psi_2\\ \psi_1' & \psi_2'\end{vmatrix}\ . \tag{9.4}$$

如果在 x 轴上点 a 处 $W=0$, 则此两解 ψ_1 与 ψ_2 在点 a 处有相同的对数导数; 如果在整个区间上 $W=0$, 则此两解线性相关, 仅相差一个归一化常数. 关于 Wronskian 行列式的一般特性, 有如下定理:

定理 1　由同一能量 E 的两个解组成的 Wronskian 行列式为常数 (不依赖于 x). 此结论与具体势的形式无关.

证明: 设 ψ_1 与 ψ_2 为属于同一能量 E 的两个解, 满足

$$\begin{aligned}
&\psi_1'' + [\epsilon - V(x)]\psi_1 = 0 \ , \\
&\psi_2'' + [\epsilon - V(x)]\psi_2 = 0 \ .
\end{aligned} \tag{9.5}$$

用 ψ_1 乘第二式减去 ψ_2 乘第一式得 (将含势的项消去)

$$\psi_1\psi_2'' - \psi_2\psi_1'' = 0 \ ,$$

积分得

$$\psi_1\psi_2' - \psi_2\psi_1' = \text{const} \ . \tag{9.6}$$

以上证明方法与推导概率流守恒时的方法类似. 对于薛定谔方程的任一解 ψ, 由于势 $V(x)$ 是实函数, 故如果 ψ 为能量本征值为 ϵ 的本征函数, 则其复共轭 ψ^* 也为属于同一能量 ϵ 的本征解, 这时粒子的概率流密度为

$$\begin{aligned}
J &= \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}(\psi\psi^{*\prime} - \psi^*\psi') \\
&= -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}W(\psi^*, \psi) \ .
\end{aligned} \tag{9.7}$$

因此, 对于实函数势 $V(x), J=0$, 即本征函数 $\psi(x)$ 的实部及虚部都是属于同一本征值的本征函数. 故如果本征值 ϵ 非简并, 即两者仅相差一常数因子, 这时概率流密度必定为零. 换言之, 仅当本征值 ϵ 的本征态简并, 才能组成概率流密度非零的解.

一维定态的解与能谱的特点　下面讨论在一般非奇异势场 $V(x)$ 情况下, 能量本征值的一般特点. 在讨论中设势与时间无关, 即为一般定态问题, 并将仔细分析相应于不同定态能量的能谱应为连续谱还是分离谱的条件, 以及能谱的简并特性.

设势 $V(x)$ 如图 9.1 所示, 在 $x \to \pm\infty$ 时 $V(x) \to V_\pm$, 并假定势 $V(x)$ 下有界, 最低点处为 V_0, 这样, $V_- > V_+ > V_0$ 便将 ϵ 的变化区域分为四个区域, 在这四个区域上本征值谱具有不同的特性.

(1) 当 $\epsilon < V_0$, ϵ 在整个区间 $(-\infty, +\infty)$ 都比 $V(x)$ 低, 故

$$\psi''(x) = (V(x) - \epsilon)\psi(x) = k^2(x)\psi(x).$$

因为 ψ'' 与 ψ 同号, 所以 ψ 总是背离 x 轴弯曲. 当 $x \to \pm\infty$ 时 k 近似为常数, 故有

$$\psi = \mathrm{e}^{\pm kx},$$

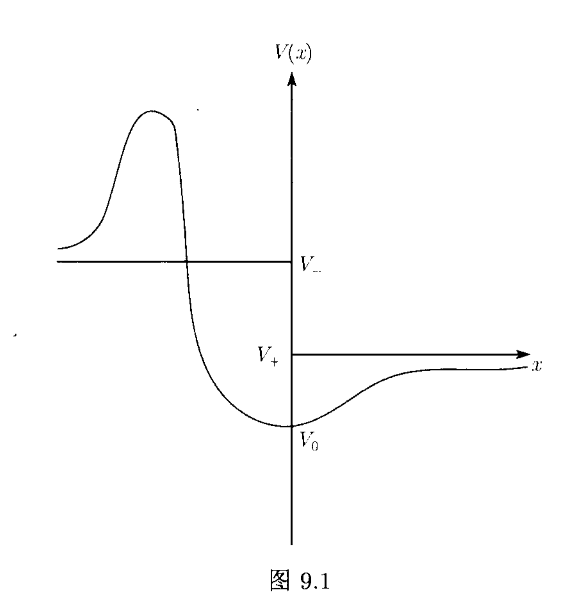


图 9.1

由于在整个区间上 $k^2(x) > 0$, 故 $\psi(x)$ 在各处均为指数行为, 使得函数 $\psi(x)$ 在 $x \to +\infty$ 或 $-\infty$ 时指数增加. 故当 $\epsilon < V_0$ 时, 没有满足在整个空间平方可积 (即可归一到 δ 函数) 的解.

(2) 当 $V_+ > \epsilon > V_0$, 通解在两个外部区间都为指数行为, 且要求都为指数衰减, 即

$$\psi(x) \to 0, \quad x \to \pm\infty. \tag{9.8}$$

而在中间区域 $\epsilon - V(x)$ 转为正值, 所以 ψ 可表示为坐标的振荡函数. 由于还要求两端指数衰减的解与中间振荡型的解要平滑连接, 结果仅对某些分离数值 ϵ 才有可能, 故能级分离. 另外由 (9.8) 式可知, 对于任意两解, 其 Wronskian 行列式在 $x \to \pm\infty$ 时均为零, 这样由定理一知, Wronskian 行列式在整个区间 $(-\infty, +\infty)$ 恒等于零, 概率密度 $J = 0$, 波函数为实, 于是有如下定理:

定理 2 一维运动束缚态的能级分立, 且都不简并; 一维束缚态的波函数为实函数.

(3) 当 $V_- > \epsilon > V_+$, 通解在两个外部区间的渐近解形式为

$$\psi(x) \Rightarrow A e^{k_- x}, \qquad x \to -\infty, \tag{9.9}$$

$$\psi(x) \Rightarrow B \cos(k_+ x + \alpha_+), \quad x \to +\infty, \tag{9.10}$$

其中,

$$k_- = \sqrt{V_- - \epsilon},$$
$$k_+ = \sqrt{\epsilon - V_+},$$

由于 (9.9) 式在 x 轴的最左端只有一个指数衰减解, 当 x 逐渐增大过渡到最右端时, 要求与右端 (9.10) 式的解平滑连接, 由此可确定相角 α_+ 的数值 (α_+ 为 ϵ 的函数, 而 A、B 为归一化常数). 所以对于在 $V_- > \epsilon > V_+$ 区间的任意 ϵ, 都可存在一个在整个区间满足要求的解, 故 ϵ 为连续谱. 此外, 由于当 $x \to -\infty$ 时解趋于零, 故同一 ϵ 的任两个解的 Wronskian 行列式恒等于零, 所以这时能级仍不简并.

(4) 当 $\epsilon > V_-$, 解在两个外部区间的渐近解都可表示为振荡函数 (都是经典允许区)

$$\psi(x) \sim A\cos(k_- x + \alpha_-), \quad x \to -\infty, \tag{9.11}$$

$$\psi(x) \sim B\cos(k_+ x + \alpha_+), \quad x \to +\infty, \tag{9.12}$$

其中,

$$k_- = \sqrt{\epsilon - V_-},$$
$$k_+ = \sqrt{\epsilon - V_+},$$

A, α_-, B, α_+ 为四个待定常数. 为使波函数光滑连接 (即要求波函数及其一阶导数均连续), 可确定其中两个常数, 剩下的除一个为归一常数外, 还有一个任意常数, 因此在这种情况下, 对于每一能量本征值, 都有两个线性独立的解, 即能量本征值是二重简并的连续谱. 这时, 可以获得 $J \neq 0$ 的本征态.

一维散射的正问题　需要特别说明的是, (9.11) 式和 (9.12) 式的两个解之间的位相差

$$\boldsymbol{\Delta}\alpha(k) = \alpha_+ - \alpha_-$$

完全由散射势 $V(x)$ 的形状及相应的能量本征值$\left(E = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}\right)$决定. 散射的正问题即从散射势 $V(x)$ 出发研究散射相移 $\boldsymbol{\Delta}\alpha(k)$, 而反散射问题则是从散射相移 $\boldsymbol{\Delta}\alpha(k)$ 出发研究散射势 $V(x)$ 的具体形状. 可以证明, 散射相移 $\boldsymbol{\Delta}\alpha(k)$ 再加上与束缚态有关的量 (如能谱 E_n 及波函数归一化因子 A_n 等) 可唯一确定散射势 $V(x)$.

现在先简单分析一下一维散射的正问题.

利用自由粒子的格林函数, 可以将 (9.3) 式的解表示为

$$\psi(x,k) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_+ x} + \int_x^{\infty} \frac{\sin k_+(y-x)}{k_+}(V(y) - V_+)\psi(y,k)\mathrm{d}y\ , \tag{9.13}$$

其中,

$$k_+^2 = \epsilon - V_+.$$

(9.13) 式满足渐近条件

$$\psi(x,k) \to \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_+ x}, \quad 当 \quad x \to +\infty. \tag{9.14}$$

易证满足积分方程 (9.13) 式的波函数 $\psi(x,k)$ 必定满足薛定谔方程 (9.3) 式以及渐近条件 (9.14) 式, 或者说, 积分方程 (9.13) 式是将微分方程 (9.3) 式及定解条件 (9.14) 式结合在一起的方程. 进一步还可以证明, 解 $\psi(x,k)^*$ 与 $\psi(x,k)$ 是线性无关的基本解 (当 $k_+\neq 0$), 这是因为二者之间的 Wronskian 行列式为

$$W(\psi^*,\psi)=2\mathrm{i}k_+\neq 0\ .$$

再由 (9.7) 式知, 解 (9.13) 式相当于具有粒子流密度

$$J=\frac{\hbar k_+}{m}$$

的解. 类似地, 可将在 $x\to-\infty$ 区域的解表示为

$$\varphi(x,k)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_-x}+\int_{-\infty}^{x}\frac{\sin k_-(x-y)}{k_-}(V(y)-V_-)\varphi(y,k)\mathrm{d}y, \tag{9.15}$$

其中,

$$k_-^2=\epsilon-V_-.$$

此解满足渐近条件

$$\varphi(x,k)\to\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_-x},\quad 当\quad x\to-\infty. \tag{9.16}$$

而且解 $\varphi(x,k)^*$ 与 $\varphi(x,k)$ 组成线性无关的基本解 (当 $k_-\neq 0$)

$$W(\varphi^*,\varphi)=-2\mathrm{i}k_-\neq 0.$$

以上讨论说明, 具有确定能量的解是二重简并的, 任意解可用这两个线性无关解展开. 先将解 $\varphi(x,k)$ 用基本解 ψ^* 与 ψ 的线性组合来表示为

$$\varphi(x,k)=a\psi(x,k)^*+b\psi(x,k), \tag{9.17}$$

并要求此解在左右两渐近区域的渐近行为是

$$\begin{aligned}\varphi(x,k)&\to\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_-x}, &&当\quad x\to-\infty,\\ &\to a\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_+x}+b\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_+x}, &&当\quad x\to+\infty.\end{aligned} \tag{9.18}$$

由于 Wronskian 行列式应为常数, 可以证明

$$|a|^2-|b|^2=\frac{k_-}{k_+}. \tag{9.19}$$

具有渐近行为 (9.18) 式的解, 可解释为从 $x=\infty$ 处向左入射平面波 $a\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_+x}$, 经位势 $V(x)$ 散射后, 一部分 $b\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_+x}$ 被位势反射, 而另一部分 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_-x}$ 穿过位势继续向左传播. 按照概率流密度公式可得, 反射系数

$$R_\varphi=\left|\frac{J_r}{J_{in}}\right|=\frac{|b|^2}{|a|^2}\ , \tag{9.20}$$

透射系数

$$T_\varphi = \left|\frac{J_t}{J_{in}}\right| = \frac{k_-}{k_+}\,\frac{1}{|a|^2}\ . \tag{9.21}$$

由 (9.19) 式可知

$$R_\varphi + T_\varphi = 1. \tag{9.22}$$

结果是自洽的.

类似地, 也可将解 $\psi(x,k)$((9.13) 式) 用基本解 φ^* 与 φ 的线性组合表示为

$$\psi(x,k) = c\varphi(x,k)^* + d\varphi(x,k), \tag{9.23}$$

并要求此解在左右两渐近区域的渐近行为是

$$\begin{aligned}\psi(x,k) &\to c\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_- x} + d\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_- x}, \quad \text{当}\ x\to-\infty;\\ &\to \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_+ x}, \qquad\qquad\qquad \text{当}\ x\to+\infty.\end{aligned} \tag{9.24}$$

此渐近行为的解可以代表由 $x=-\infty$ 处沿 x 轴方向的入射波 $c\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_- x}$, 被势 $V(x)$ 散射后分裂为反射波 $d\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_- x}$ 与透射波, 透射波沿 x 轴传播, 在 $x\to+\infty$ 区域的渐近式为 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_+ x}$. 按照概率流密度公式计算可得反射系数

$$R_\psi = \frac{|d|^2}{|c|^2}, \tag{9.25}$$

透射系数

$$T_\psi = \frac{k_+}{k_-}\,\frac{1}{|c|^2}, \tag{9.26}$$

且同样可证

$$R_\psi + T_\psi = 1. \tag{9.27}$$

(9.27) 式与 (9.22) 式相同, 均称为流守恒关系式.

具有确定能量 E 的本征函数 ψ 与 φ 以及它们的复共轭 ψ^* 与 φ^*, 都是定态薛定谔方程具有同一能量本征值的解, 且其中只有两个是线性独立解. 因此, 其中任两个解组成的 Wronskian 行列式由定理一知均为与 x 无关的常数 (见 (9.6) 式), 于是, 由 (9.17) 式和 (9.23) 式可以证明

$$W(\varphi,\psi) = aW(\psi^*,\psi) = cW(\varphi,\varphi^*),$$

即

$$ak_+ = ck_-. \tag{9.28}$$

再由其复共轭式可证

$$T_\varphi = T_\psi. \tag{9.29}$$

由此可得如下定理:

定理三(倒易定理) 对于一定能量的定态解, 波的透射系数与波的传播方向无关, 反射系数也与波的传播方向无关.

在上面仅简单分析了散射态的一般特点, 下面将利用 k 值的解析延拓技术来分析束缚态能谱和本征态的归一常数, 并简单介绍一下薛定谔方程的反散射问题.

我们知道在研究核物理问题时, 假定核力可用量子力学中位势来描写, 但又仅知道它的一般性质, 具体形式不知道. 尽管从实验上可以定出能级和散射相移等, 但如何反过来确定散射位势, 仍是一个很难处理的问题. 在这里将要说明, 对于一维薛定谔方程描述的可积体系, 其反散射问题可以严格求解.

散射态与 Jost 解 为简单起见, 假定位势 $V(x)$ 在 $x\to\pm\infty$ 时比 $|x|^{-1-0^+}$ 还要快的趋于零 (即 $V_\pm=0, k_\pm=k=\sqrt{\epsilon}$), 这样, 薛定谔方程在无穷远处的散射态渐近解 $\propto \mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}kx}$. 因此, 常常可以选取具有如下渐近行为的散射态解 (称为 Jost 解)

$$\varphi_k(x)\to\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx},\quad 当\ x\to-\infty; \tag{9.30}$$

$$\psi_k(x)\to\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx},\quad 当\ x\to+\infty. \tag{9.31}$$

Jost 解满足如下形式的积分方程 (见 (9.13) 和 (9.17) 式, 现简化为 $V_+=V_-=0, k_+=k_-=k$):

$$\varphi_k(x)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}+\int_{-\infty}^{x}\frac{\sin k(x-y)}{k}V(y)\varphi_k(y)\mathrm{d}y\ , \tag{9.32}$$

$$\psi_k(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}-\int_{x}^{\infty}\frac{\sin k(x-y)}{k}V(y)\psi_k(y)\mathrm{d}y. \tag{9.33}$$

这两组线性独立的 Jost 解之间可以通过线性组合来相互表达 (如 (9.17) 式), 即

$$\varphi_k(x)=a(k)\psi_k^*(x)+b(k)\psi_k(x). \tag{9.34}$$

由于二阶常微分方程相同本征值的两个解的 Wronskian 行列式与 x 无关, 因此利用 Jost 解的渐近形式可以求得

$$W(\varphi_k(x),\varphi_k^*(x))=2\mathrm{i}k, \tag{9.35}$$

$$W(\psi_k(x),\psi_k^*(x))=-2\mathrm{i}k. \tag{9.36}$$

再由 (9.34) 式可以解得散射系数 (即线性组合系数)

$$a(k)=\frac{1}{2\mathrm{i}k}W(\varphi_k(x),\psi_k(x)), \tag{9.37}$$

$$b(k)=\frac{1}{2\mathrm{i}k}W(\psi_k^*(x),\varphi_k(x)). \tag{9.38}$$

束缚态与解析延拓技术　我们需要对依赖 k 的函数 (如散射系数) 做解析延拓, 并设法通过散射态 (Jost 态) 获得 k 为纯虚数时 $(E<0)$ 束缚态有关的基本信息.

为此, 将 Jost 解 (9.32) 式改写, 并令

$$f_k(x)=\varphi_k(x)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}=1+\int_{-\infty}^{x}\frac{\mathrm{e}^{2\mathrm{i}k(x-y)}}{2\mathrm{i}k}V(y)f_k(y)\mathrm{d}y\ .$$

用迭代法可得到 $f_k(x)$ 的 Neumann 展开形式

$$f_k(x)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\Big(\int_{-\infty}^{x}\frac{\mathrm{e}^{2\mathrm{i}k(x-y)}}{2\mathrm{i}k}V(y)\mathrm{d}y\Big)^n. \tag{9.39}$$

现在将 k 延拓至复平面, 当 $\mathrm{Im}k>0$, 有

$$\Big|\int_{-\infty}^{x}\frac{\mathrm{e}^{2\mathrm{i}k(x-y)}}{2\mathrm{i}k}V(y)\mathrm{d}y\Big|\leqslant\frac{1}{|k|}\int_{-\infty}^{x}|V(y)|\mathrm{d}y\leqslant\frac{1}{|k|}\int_{-\infty}^{\infty}|V(y)|\mathrm{d}y\equiv\frac{\Lambda}{|k|},$$

因此

$$|f_k(x)|\leqslant\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\Big(\frac{\Lambda}{|k|}\Big)^n=\mathrm{e}^{\Lambda/|k|}.$$

由于 Neumann 展开 (9.39) 式中的每项均为 k 的解析函数, 且当 $\mathrm{Im}k>0$ 时级数一致收敛, 故 $f_k(x)$ 在 k 的上半平面解析. 因此, Jost 解 $\varphi_k(x)$ 在 k 的上半平面解析.

类似可证 Jost 解 $\psi_k(x)$ 在 k 的上半平面也解析, 因而由 (9.37) 式知, 散射系数函数 $a(k)$ 在 k 的上半平面解析.

现在来讨论束缚态问题. 在 k 的上半平面散射系数 $a(k)$ 可能存在零点 $k=k_i$,

$$a(k_i)=0\ ,\quad \mathrm{Im}\ k_i>0.$$

这时由 (9.37) 式可知, 在该点处 $\varphi_i(x)\equiv\varphi_{k_i}(x)$ 与 $\psi_i(x)\equiv\psi_{k_i}(x)$ 成比例, 即

$$\varphi_i(x)=b_i\psi_i(x)$$

由于 $\kappa_i=\mathrm{Im}\ k_i>0$, 所以当 $|x|\to\infty$ 时, 上式两端在渐近区域均指数衰减 (当 $x\to-\infty$ 时, 左端趋于 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_ix}\to\mathrm{e}^{\kappa_ix}$; 当 $x\to\infty$ 时, 右端趋于 $b_i\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_ix}\to b_i\mathrm{e}^{-\kappa_ix}$), 表明为束缚态.

对于 k_i 为纯虚数的情况, 记 $k_i=\mathrm{i}\kappa_i$, κ_i 为正实数. $k_i^2=E_i<0$, 是算子

$$L(V)=-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x)$$

的离散谱.

散射数据与反散射方法 由算子 $L(V)$ 的本征值问题得到的数据 (data) 集合

$$\mathbf{S} = \{R(k) = b(k)/a(k), \quad \kappa_i, |b_i|, i = 1, 2, \cdots\},$$

称为散射数据. 当给定位势 $V(x)$, 可以求得散射数据, 这是散射的正问题. 而散射的反问题是已知散射数据, 确定位势 $V(x)$.

由 $\varphi_k(x)$、$\psi_k(x)$ 在 k 的上半平面的解析性以及它们在 $|x| \to \infty$ 的渐近性质, 可以证明: 当 k 为实数时, 有

$$\varphi_k(x) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} + \int_{-\infty}^{x} N(x,y)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ky}\mathrm{d}y, \quad k \in \mathbf{R}, \tag{9.40}$$

其中, $N(x,y)$ 为实函数, 且

$$N(x,y) = 0, \quad 当 \quad y > x.$$

同理可证: 当 k 为实数时, 有

$$\psi_k(x) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + \int_{x}^{\infty} K(x,y)\mathrm{e}^{\mathrm{i}ky}\mathrm{d}y, \quad k \in \mathbf{R}, \tag{9.41}$$

其中, $K(x,y)$ 为实函数, 且

$$K(x,y) = 0, \quad 当 \quad y < x$$

为确定势函数 (常称为反散射), 从 (9.34) 式出发, 得

$$\begin{aligned}\frac{1}{a(k)}\varphi_k(x) &= \psi_k^*(x) + R(k)\psi_k(x)\\ &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} + \int_{x}^{\infty} K(x,y)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ky}\mathrm{d}y + R(k)\psi_k(x),\end{aligned}$$

将上式中在 k 的上半平面解析的部分移至左端, 即

$$\frac{1}{a(k)}\varphi_k(x) - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} = \int_{x}^{\infty} K(x,y)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ky}\mathrm{d}y + R(k)\psi_k(x). \tag{9.42}$$

在 (9.42) 式两端乘以 $\dfrac{1}{2\pi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}$ 后对 k 沿实轴积分, 右端第一项

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{x}^{\infty} K(x,y)\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(z-y)}\mathrm{d}y\mathrm{d}k = K(x,z), \quad 当\ z > x\ .$$

所以 (9.42) 式右端为

$$\begin{aligned}\text{r.h.s} = K(x,z) &+ \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} R(k)\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(x+z)}\mathrm{d}k\\ &+ \frac{1}{2\pi}\int_{x}^{\infty} K(x,y)\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(y+z)}R(k)\mathrm{d}k\mathrm{d}y, \quad 当\ z > x\ .\end{aligned} \tag{9.43}$$

为计算 (9.42) 式左端, 对 k 沿实轴的积分, 并作如下处理：由于被积函数在 k 的上半平面解析, 当 $z > x$ 时, 对沿实轴的积分, 可再加上 k 的上半平面大半圆弧的积分, 整体组成回路积分, 这样由留数定理得

$$\begin{aligned}\text{l.h.s} &= \frac{1}{2\pi}\oint\left(\frac{1}{a(k)}\varphi_k(x) - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}\mathrm{d}k \\ &= \mathrm{i}\sum_i \frac{1}{a(k_i)}\varphi_i(x)\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_i z} = -\sum_i \rho_i\psi_i\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_i z} \\ &= -\sum_i \rho_i\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_i(x+z)} + \int_x^\infty K(x,y)\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_i(y+z)}\mathrm{d}y\right),\end{aligned}$$

其中,

$$\rho_i = \frac{b_i}{\mathrm{i}a(k_i)}\ .$$

将以上两端的计算结果合并, 得

$$\begin{aligned}&K(x,z) + \sum_i \rho_i\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_i(x+z)} + \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^\infty R(k)\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(x+z)}\mathrm{d}k \\ &+ \int_x^\infty \mathrm{d}yK(x,y)\left[\sum_i \rho_i\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_i(y+z)} + \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^\infty R(k)\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(y+z)}\mathrm{d}k\right] = 0.\end{aligned}$$

令

$$B(x) = \sum_i \rho_i\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_i x} + \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^\infty R(k)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\mathrm{d}k \tag{9.44}$$

则 (9.44) 式也即 (9.42) 式可表示为

$$K(x,z) + B(x+z) + \int_x^\infty \mathrm{d}yK(x,y)B(y+z) = 0, \quad 当\ \ z > x. \tag{9.45}$$

(9.45) 式称为 Gel'fand-Levitan-Marchenko 反散射方程 (记为 GLM 方程). 当散射数据 $\{R(k), \kappa_i, \rho_i\}$ 给定后, 即已知函数 $B(x)$, 则通过求解积分方程可以决定势函数 $K(x,z)$, 进而确定位势.

事实上, 与 (9.39) 式类似, 由 (9.33) 式出发, 由迭代法可得 $\psi_k(x)$ 的 Neumann 展式

$$\psi_k(x) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\left[1 - \frac{1}{2\mathrm{i}k}\int_x^\infty V(y)\mathrm{d}y + O(k^{-2})\right], \quad 当\ \ |k| \to \infty\ .$$

另外再由 (9.41) 式, 当 $|k| \to \infty$ 时, 有

$$\psi_k(x) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} - \frac{1}{\mathrm{i}k}K(x,x)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + O(k^{-2}).$$

对上两式比较, 可得

$$V(x) = -2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}K(x,x)\ . \tag{9.46}$$

因此, 由 GLM 方程的解, 可以完全确定位势函数 $V(x)$. 从而证明了一维薛定谔方程的反散射问题可以严格求解.

9.2 超对称量子力学与 Darboux 变换, 无反射势及其束缚态解

Darboux 变换 对于量子力学一维定态问题, 亦即哈密顿量 H 的本征值问题

$$H\psi = \Big(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + u(x) \Big)\psi = E\psi. \tag{9.47}$$

常常可以因式化, 因此可以作超对称量子力学分析, 即

$$-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + u(x) - E_0 = A^+ A\ , \tag{9.48}$$

其中,

$$A = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - \sigma(x)\ , \quad A^+ = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - \sigma(x), \tag{9.49}$$

$$u(x) = \sigma^2(x) + \sigma'(x) + E_0. \tag{9.50}$$

当上面的 Ricatti 方程可解, 即由 $u(x)$ 可以解出 $\sigma(x)$, 则相应的定态薛定谔算子可如 (9.48) 式因式化, 这时引入其超伙伴体系

$$H^{(1)} = -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + v(x) = AA^+ + E_0, \tag{9.51}$$

$$v(x) = \sigma^2(x) - \sigma'(x) + E_0. \tag{9.52}$$

哈密顿量 H 的本征值为 E_0 的解 ψ_0 满足

$$A\psi_0 = \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - \sigma(x) \right) \psi_0 = 0,$$

即

$$\sigma(x) = \psi_0'/\psi_0 = \partial_x \ln \psi_0. \tag{9.53}$$

$H^{(1)}$ 与 H 具有相同的能谱 (基态 E_0 除外).

进一步分析会发现薛定谔方程 (9.47) 式在下面的变换下, 称为 Darboux 变换:

$$u \to v = u - 2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} \ln \psi_0, \tag{9.54}$$

$$\psi \to \varphi = \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - \sigma \right) \psi = \psi_x - \frac{\psi_0'}{\psi_0}\psi = \frac{W(\psi_0, \psi)}{\psi_0}, \tag{9.55}$$

是协变的, 即相应地存在满足方程

$$H^{(1)}\varphi(x)=\Big(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+v(x)\Big)\varphi(x)=E\varphi(x) \tag{9.56}$$

的解 $\varphi(x)$. Darboux 变换使我们从可解方程 (9.47) 式出发, 得到另一可解方程 (9.56) 式, 而且可由方程 (9.55) 式给出方程 (9.56) 式的所有解. Darboux 变换 $(u,\psi)\to(v,\varphi)$, 即 (9.54) 和 (9.55) 式, 在 $\psi_0\neq 0$ 处是有效的.

无反射势及其束缚态　作为 Darboux 变换的应用, 先来讨论最简单的情况: 即分析 $u=0$ 时薛定谔方程 (9.47) 式的 $E_0=-\kappa^2$ $(\kappa>0)$ 的束缚态解. 此时

$$-\psi_{xx}=-\kappa^2\psi\ , \tag{9.57}$$

其解为下列三种形式之一: $\mathrm{e}^{\pm\kappa x}$、$\cosh\kappa x$、$\sinh\kappa x$. 选

$$\psi_0=\cosh\kappa x,\quad \sigma=\kappa\tanh\kappa x \tag{9.58}$$

代入 (9.54) 式, 得

$$v=-\frac{2\kappa^2}{\cosh^2\kappa x}. \tag{9.59}$$

因此相应于薛定谔方程 (9.56) 式中的势为实的、非奇异的无反射势. 在 (9.55) 式中令 $\psi=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$, 可得能量为 $E=k^2$ 的解 (自由粒子平面波解), 得

$$\varphi(x)=(\mathrm{i}k-\kappa\tan kx)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}, \tag{9.60}$$

其渐近形式为

$$\begin{aligned}\varphi(x)&\approx(\mathrm{i}k-\kappa)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx},\qquad x\to+\infty,\\ \varphi(x)&\approx(\mathrm{i}k+\kappa)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx},\qquad x\to-\infty.\end{aligned}$$

与上节 (9.24) 式比较后会发现, 此解相当于 (9.24) 式中的系数取

$$c(k)=\frac{\mathrm{i}k+\kappa}{\mathrm{i}k-\kappa},\qquad d(k)=0.$$

从而表明在势 (9.59) 式中运动的粒子无反射 (见 (9.25) 式).

对于正能态, k 取实值, $|c(k)|=1$. 对于负能态, 令 $k=\mathrm{i}\kappa$, 则

$$\varphi(x)=-\kappa(1+\tanh\kappa x)\mathrm{e}^{-\kappa x}\to\begin{cases}-2\kappa\mathrm{e}^{-\kappa x}, & x\to\infty,\\ -2\kappa\mathrm{e}^{\kappa x}, & x\to-\infty\end{cases}$$

是束缚态. 相应势 (9.59) 式称为无反射势, 它是最简单的非奇异无反射势.

现在来讨论通常的一维定态问题中的无反射势及其束缚态情况.

当光滑势 $V(x)$ 在 $x \to \pm\infty$ 时比 $|x|^{-1-0^+}$ 还要快地趋向于零, 则相应薛定谔方程的渐近解 $\propto \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}kx}$. 选取具有如下渐近行为的解 (称为 Jost 解 $f_k(x)$):

$$f_k(x) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + o(1), \quad x \to \infty;$$
$$f_k(x) \sim a(k)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + b(k)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}, \quad x \to -\infty. \tag{9.61}$$

将由势 (9.59) 式得到的解 (9.60) 式重新归一后, 得到的 Jost 解为

$$f_k(x) = \frac{\mathrm{i}k - \kappa \tanh \kappa x}{\mathrm{i}k - \kappa}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx},$$
$$a(k) = \frac{\mathrm{i}k + \kappa}{\mathrm{i}k - \kappa}, \quad b(k) = 0. \tag{9.62}$$

因此, 对于 k 为实数时的正能解, $|a(k)| = 1$, 表明正能运动粒子无反射. 对于 k 为纯虚数时的负能解, 先将 k 延拓为复数, $a(k)$ 在 k 的上半平面的零点 $k = \mathrm{i}\kappa$ 处

$$f_{i\kappa}(x) = \frac{1}{2}(1 + \tanh \kappa x)\mathrm{e}^{-\kappa x} \to \begin{cases} \mathrm{e}^{-\kappa x}, & x \to \infty, \\ \mathrm{e}^{\kappa x}, & x \to -\infty. \end{cases}$$

所以, 当把 Jost 解解析延拓到 k 的上半平面时, 在 $k = \mathrm{i}\kappa$ 处产生一束缚态解, 它是无反射势 (9.59) 式哈密顿量

$$H = -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - \frac{2\kappa^2}{\cosh^2 \kappa x}$$

的唯一束缚态解.

N 次 Darboux 变换 将 Darboux 变换进一步推广, 即从 $a = 0$ 出发, 令

$$\psi_1 = \cosh \kappa_1(x - c_1),$$
$$\psi_2 = \sinh \kappa_2(x - c_2),$$
$$\psi_3 = \cosh \kappa_3(x - c_3),$$
$$\vdots$$
$$\psi_N = \begin{cases} \cosh(\kappa_N - c_N), & \text{当 } N \text{ 为奇数}, \\ \sinh(\kappa_N - c_N), & \text{当 } N \text{ 为偶数}. \end{cases} \tag{9.63}$$

经过 N 次 Darboux 变换后, 势与 Jost 解变为

$$V^{[N]} = -2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} \ln W(\psi_1, \cdots, \psi_N), \tag{9.64}$$

$$f^{[N]} = \frac{W(\psi_1, \cdots, \psi_N, \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx})}{W(\psi_1, \cdots, \psi_N) \prod_{j=1}^{N} (\mathrm{i}k - \kappa_j)}. \tag{9.65}$$

这样得到的势 (9.64) 式是包含有 $2N$ 个实参数的无反射势:

$$a(k)=\prod_{j=1}^{N}\frac{k-\mathrm{i}\kappa_j}{k+\mathrm{i}\kappa_j};\quad b(k)=0\ . \tag{9.66}$$

进一步将 Jost 解 $f_k^{[N]}$ 解析地延拓到复 k 平面上, 可以证明, 当

$$E=k^2=-\kappa_j^2\ ,\quad j=1,2,\cdots,N \tag{9.67}$$

时, 哈密顿量

$$H=-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V^{[N]}$$

有束缚态解.

9.3　孤立波与 KdV 方程, 含时 Darboux 变换与反散射变换

孤立波与 KdV 方程　9.2 节已经证明在薛定谔方程 (9.47) 式中, 如果势 $u(x)$ 取 (9.59) 式中的无反射势, 即

$$u(x)=-2a^2\mathrm{sech}^2ax,$$

则在此势阱中, 定态薛定谔方程有一束缚态解. 若在上式中做变量变换 $x\to x-ct$, 使得势阱随时间变化, 即相当于位势取含时的孤立波形式 (其形式很像单孤子解)

$$u(x,t)=-2a^2\mathrm{sech}^2a(x-ct)\ . \tag{9.68}$$

这时, 薛定谔方程的能量 E 仍可保持不随时间改变. 这时相应的束缚态波函数为

$$\psi(x,t)=\sqrt{\frac{a}{c}}\mathrm{sech}\,a(x-ct), \tag{9.69}$$

满足方程

$$\psi_{xx}+(E-u(x,t))\psi=0\ . \tag{9.70}$$

另一方面, 波函数 (9.69) 式随时间的改变 ψ_t 可以用 ψ 及 ψ_x 表示为

$$\begin{aligned}\psi_t&=-u_x\psi+(4E+2u)\psi_x\\&=-4\psi_{xxx}+6u\psi_x+3u_x\psi\ .\end{aligned} \tag{9.71}$$

这样, 将 (9.70) 式与 (9.71) 式结合, 可得其可积条件 ($\psi_{xxt} = \psi_{txx}$)

$$(u_t - 6uu_x + u_{xxx} - E_t)\psi = 0 \ .$$

如果进一步要求 E 保持常数, 即 $E_t = 0$, 则上式中的自洽性条件将要求 $u(x,t)$ 应满足方程

$$u_t - 6uu_x + u_{xxx} = 0 \ , \tag{9.72}$$

(9.72) 式正是著名的可积体系的非线性演化方程 ——KdV 方程.

9.2 节曾证明 (9.70) 式在 Darboux 变换下是协变的, 也容易证明: (9.71) 式在含有时间参量的 Darboux 变换下仍然是协变的. 因此利用 (9.70) 式和 (9.71) 式在 Darboux 变换下的协变性, 可以获得 KdV 方程的新解.

Lax 对与反散射变换 为分析 KdV 方程的可积性, 常将 (9.70) 式和 (9.71) 式改写为如下形式:

$$\begin{aligned} &L\psi = E\psi, \quad L = -\partial_x^2 + u(x,t) \ , \\ &\psi_t = M\psi, \quad M = -4\partial_x^3 + 6u\partial_x + 3u_x \ . \end{aligned} \tag{9.73}$$

这时, KdV 方程可表示为算子 L 和 M(称为 Lax 对或 Lax 算子) 满足的相容性方程

$$\partial_t L + [L, M] = 0 \ . \tag{9.74}$$

在非线性问题的研究中, 可积体系的非线性演化方程的一个突出特点, 就是具有 Lax 对表示, 即可表示成一组线性方程组的相容条件. Lax 对算子的形式具有深刻的几何意义和物理意义, 并且可以表示为哈密顿力学体系.

进一步可以证明: 与 KdV 方程相应的力学体系具有无穷多守恒流, 即在力学体系解的集合上作用有无穷维李群, 可作代数几何分析. 此外, 经典的 KdV 方程存在孤子解, 其特点是:

(1) 在空间有限区域内稳定存在;

(2) 具有有限能量.

这些特征在孤子的运动及其相互作用过程中都将保持不变.

为求量子孤子解, 常用反散射变换的方法. 或者说, 可利用反散射变换可以找到满足 $u(x,0)$ 的初条件的 KdV 方程 ((9.72) 式) 的解.

事实上, 通过前面的分析我们可以看出, 当用 KdV 方程的解 $u(x,t)$ 作为薛定谔方程的势时, Lax 算子

$$L[u] = -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + u(x,t) \equiv L(t)$$

依赖于时间 t. 但是如果要求其本征值 $E=k^2$ 与 t 无关, 则一定存在幺正算子 $U(t)$, 满足

$$
\begin{aligned}
L(t) &= U(t)L(0)U(t)^{-1} \ , \\
\psi(t) &= U(t)\psi(0) \ , \\
\frac{\partial}{\partial t}\psi(t) &= \frac{\partial U}{\partial t}\psi(0) = \frac{\partial U}{\partial t}U^{-1}\psi(t) = M\psi(t) \ .
\end{aligned}
\tag{9.75}
$$

这时, KdV 方程的解满足 Lax 对的相容性条件 (9.74) 式. 也就是说, 满足 Lax 算子 $L[u]$ 的本征方程

$$
L[u]\varphi_k(x,t) = k^2\varphi_k(x,t)
$$

的本征态 $\varphi_k(x,t)$ 随时间的演化, 完全由另一 Lax 算子 $M[u]$ ((9.73) 式) 确定, 即

$$
\frac{\partial}{\partial t}\varphi_k(x,t) = M[u]\varphi_k(x,t) \ . \tag{9.76}
$$

这样, 当 $u(x,t)$ 按 KdV 方程演化时, $L[u]$ 的本征态保持不变.

由 (9.73) 式可知, 当 $|x|$ 很大时 $M[u]\to -4\partial_x^3$, 故本征态 φ_k 有如下渐近行为:

$$
\varphi_k(x,t) = \begin{cases} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx-4\mathrm{i}k^3t} + R_k\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx+4\mathrm{i}k^3t}, & 当\ x\to-\infty; \\ T_k\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx-4\mathrm{i}k^3t}, & 当\ x\to+\infty. \end{cases} \tag{9.77}
$$

上述结果表明, 穿透系数 T_k 保持为常数, 而反射系数 R_k 按下面的方式演化:

$$
R_k(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}8k^3t}R_k(0) \ . \tag{9.78}
$$

类似地, 当出现束缚态孤立波时, 其特征数据为 (κ_i,ρ_i), 此时 κ_i 保持为常数, 而 ρ_i 按如下方式演化:

$$
\rho_i(t) = \mathrm{e}^{-8\kappa_i^3t}\rho_i(0) \ . \tag{9.79}
$$

KdV 方程为可积的非线性偏微分方程, 直接求解一般很困难. 但是, KdV 方程作为可积的非线性演化方程, 现在变成在给定初始条件下

$$
u(x,0) = f(x),
$$

寻找 KdV 方程随时间演化的解 $u(x,t)$. 这正是反散射变换的基本思想.

对于可积演化方程, 反散射变换方法的求解过程可概括如下:

(1) 由给定初始条件为 $u(x,0)$, 求解薛定谔算子 $L[u(x,0)]$ 的本征值问题, 获得散射数据 $S=\{R_k(0),\kappa_i,\rho_i(0),i=1,2,\cdots\}$;

(2) 要求散射数据按照 KdV 方程的约束进行演化

$$
S\to S(t) = \{R_k(t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}8k^3t}R_k(0),\kappa_i,\rho_i(t)=\mathrm{e}^{-8\kappa_i^3t}\rho_i(0),i=1,2,\cdots\};
$$

(3) 再利用 GLM 方程解反散射问题, 求得随时间演化的势 $u(x,t)$.

可将上述步骤图示为

$$
\begin{array}{ccc}
u(x,0) & \xrightarrow{\text{KdV方程}} & u(x,t) \\
\text{定态薛定谔方程}\ \big\downarrow & & \big\uparrow\ \text{GLM方程} \\
\text{散射数据S} & \xrightarrow{U_\infty(t)} & S(t)
\end{array}
\tag{9.80}
$$

KdV 方程为可积的非线性偏微分方程, 用上述方法找其随时间演化的解 $u(x,t)$, 由于定态薛定谔方程及 GLM 方程都是线性方程, 而散射数据随时间演化 $S(t)$ 可仅利用在 $|x|\to\infty$ 时渐近条件下的演化算子 $U_\infty(t)$ 来确定, 因此求解非线性方程的难度会大大简化.

9.4 有限维近可积体系与 KAM 定理

前面以 KdV 方程为例介绍了无穷维可积体系的一些基本特性, 以及求解的基本方法与思想. 本节先简单介绍有限维哈密顿可积体系, 并对体系的可积性与不可积性作一些分析.

可积体系与不变环面 对于经典动力学体系, 当给定体系的哈密顿量 $H(q,p,t)$ 后, 相应的运动方程

$$\dot{q}_j=\frac{\partial H}{\partial p^j},\quad \dot{p}_j=-\frac{\partial H}{\partial q^j},\quad j=1,\cdots,n \tag{9.81}$$

在大多情况下都很难给出明显的解式, 或者说, 哈密顿体系绝大多数都是不可积的, 并显示有混沌运动. 为了分析混沌运动产生的根源及其运动特点, 下面着重讨论一下有限维哈密顿体系的可积性, 并分析造成可积性破缺的特点.

在动力学体系相空间中, 任意两个函数 $F(p,q)$, $G(p,q)$ 之间可以定义泊松括号

$$\{F,G\}=\sum_{j=1}^{n}\left(\frac{\partial F}{\partial q^j}\frac{\partial G}{\partial p_j}-\frac{\partial F}{\partial p_j}\frac{\partial G}{\partial q^j}\right). \tag{9.82}$$

给定体系哈密顿量 $H(q,p,t)$ 后, 正则运动方程可表示为

$$\dot{q}_j=\frac{\partial H}{\partial p^j}=\{q_j,H\},\quad \dot{p}_j=-\frac{\partial H}{\partial q^j}=\{p_j,H\}. \tag{9.83}$$

关于有限维哈密顿体系的可积性我们有如下可积定理:

Liouville 定理 设 $\boldsymbol{R}^{2n}=\{(p,q)\}$ 为具有泊松结构的相空间, 且具有哈密顿量 $H(q,p,t)$. 如果存在 n 个相互对合的运动积分 $\{F_i(q,p,t),\ i=1,2,\cdots,n\}$

$$\{F_i,F_j\}=0\ ,\quad \frac{\mathrm{d}F_i}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial F_i}{\partial t}+\{F_i,H\}=0\ , \tag{9.84}$$

则哈密顿正则运动方程 (9.83) 式可积.

当运动积分 $\{F_i, i=1,2,\cdots,n\}$ 在相空间 $\boldsymbol{R}^{2n}=\{(p,q)\}$ 上线性独立时, 体系的每一条运动轨迹 (或称轨道) 在 $2n$ 维相空间中将被限制在一个 n 维流形 M_a 上, 即

$$M_a=\{(p,q,t)\in \boldsymbol{R}^{2n}\times R^1|F_i(q,p,t)=a_i, i=1,\cdots,n\}. \tag{9.85}$$

若 M_a 为连通紧致流形, 则 M_a 与 n 维环面同胚, 即 M_a 是一个 $\{F_i=常数\}$ 的 n 维环面. 从这环面上一点出发的运动, 其轨迹将永远在这环面上, M_a 被称为不变环面. 因此, 体系的每一条轨迹在 $2n$ 维相空间中将被限制在此 n 维流形 M_a 上, 而可积哈密顿体系在 M_a 上作周期或准周期运动.

分析动力学体系时, 正则变量的选取很重要. 对于可积体系, 通常选取的正则变量是作用–角变量 $(\boldsymbol{I},\boldsymbol{\theta})$. 由拓扑学知道, 一个 n 维环面上存在 n 个不等价的独立 1- 闭链 γ_i, 利用 $\{\gamma_i\}$ 可定义 n 个作用变量

$$\boldsymbol{I}_i=\frac{1}{2\pi}\oint_{\gamma_i}\boldsymbol{p}(\boldsymbol{q},F)\mathrm{d}\boldsymbol{q}\ . \tag{9.86}$$

可以证明体系的 n 个运动积分 $\{F_i\}$ 与这 n 个作用变量 $\{I_i\}$ 之间可以相互表示, 所以 $\boldsymbol{I}=(I_1,\cdots,I_n)$ 也是运动积分. 这样可以引入特性母函数

$$W(\boldsymbol{q},\boldsymbol{I})=\int_{\boldsymbol{q}_0}^{\boldsymbol{q}}\boldsymbol{p}(\boldsymbol{q},F(\boldsymbol{I}))\mathrm{d}\boldsymbol{q}\ , \tag{9.87}$$

利用它来作由正则变量到作用–角变量的正则变换

$$(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})\rightarrow(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{I})\ ,$$

$$\theta^i=\frac{\partial W(\boldsymbol{q},\boldsymbol{I})}{\partial I_i},\quad p^i=\frac{\partial W(\boldsymbol{q},\boldsymbol{I})}{\partial q_i}\ , \tag{9.88}$$

且

$$\oint_{\gamma_i}\mathrm{d}\theta^k=\frac{\partial}{\partial I_k}\oint_{\gamma_i}\mathrm{d}W=\frac{\partial}{\partial I_k}(2\pi I_i)=2\pi\delta_{ik}\ , \tag{9.89}$$

即 θ^k 为 1- 闭链 γ_k 的角变量, 而作用变量 $\{I_j\}$ 为运动积分. 体系的哈密顿量 H 仅为作用变量的函数

$$\dot{I}_j=-\frac{\partial H}{\partial\theta^j}=0,\quad I_j=\mathrm{const}\ ,$$

$$\dot{\theta}^j=\frac{\partial H}{\partial I^j}=\omega^j(I),\quad \theta^j=\omega^j(I)t+c^j\ . \tag{9.90}$$

可见, 不变环面上的轨道是多周期的, 即对每个角变量 θ^j, 有一个周期 $T_j=\dfrac{2\pi}{\omega^j}$.

当各频率 ω^j 之比为有理数, 则轨道是封闭的, 称为周期轨道; 否则轨道永不闭合, 并将在环面 M 上形成一个螺旋线, 无穷时间之后, 它会密集地覆盖在环面 M 上, 相当于环面 M 上的 "各态历经" (ergodic), 即轨道可到达环面 M 上的任意点到任意近的距离, 称为准周期轨道.

以上分析表明, 可积的哈密顿体系在相空间的环面上做周期或准周期运动. 运动积分 $\{I_i\}$((9.86) 式) 组成作用–角变量坐标系中的正则动量, 但它是体系的绝热不变量, 即与运动周期 $T_i = \dfrac{2\pi}{\omega^i}$ 相比, 其变化非常缓慢, 近似为常数, 或者说, 在有限时间间隔中为常量.

KAM 定理与近可积体系 可积哈密顿体系的基本特征是, 体系在由运动积分确定的环面上做周期或准周期运动. 但在现实中, 绝大多数两个以上自由度的保守哈密顿体系都是不可积的. 为说明体系不可积性的特征, 下面仅以具有两个自由度的保守哈密顿体系为例来进行分析. 设哈密顿函数可写为

$$H = H_0(J_1, J_2) + \epsilon H_1(\theta_1, \theta_2, J_1, J_2) \ , \tag{9.91}$$

其中, H_0 为可积体系, H_1 为微扰, $\theta_1, \theta_2, J_1, J_2$ 分别为体系未受微扰时的作用–角变量, ϵ 为微扰参数, 并假定用微扰方法可以求得体系 H 的解的近似表达式.

具有两个自由度体系的相空间是四维的, 由于保守系能量守恒, 使得体系在相空间中的运动由四维降到三维, 所以两个作用变量中的任意一个可以表示为其他三个变量的函数, 例如, $J_2 = J_2(\theta_1, \theta_2, J_1,)$, 因此可用 θ_1, θ_2, J_1 作为等能面 $H = E$ 上的坐标.

当 $\epsilon = 0$ 时, 体系 H_0 可积, 运动轨道落在 $J_1 =$ 常数的二维环面上, 由 (9.90) 式知

$$\theta_1(t) = \omega_1 t + \theta_1(0), \quad \theta_2(t) = \omega_2 t + \theta_2(0) \tag{9.92}$$

其中,

$$\omega_i = \frac{\partial H_0}{\partial J_i}, \quad i = 1, 2 .$$

可积体系 H_0 在相空间环面上作周期或准周期运动, 并具有以下性质:

(1) 当频率比 $\alpha = \dfrac{\omega_1}{\omega_2}$ 为有理数时, 轨道是闭合的, 环面由无数根周期轨道组成, 称为有理环面. 有理环面在相空间处处稠密但所占测度为零;

(2) 当频率比 $\alpha = \dfrac{\omega_1}{\omega_2}$ 为无理数时, 轨道永不闭合, 它将在环面上形成螺旋线, 在无限长时间后, 它们将密集地覆盖在环面上, 在环面上 "各态历经", 环面由无数根准周期轨道组成, 称为无理环面.

当 $\epsilon \neq 0$, 哈密顿量 H 如 (9.91) 式所示含有了角变量 θ_i, 这使得作用变量 J_i 不再是守恒量. 如果加微扰后不变环面仍然存在, 则体系必然存在新的作用–角变

量 (I_k, Θ_k), 使得

$$H(J_i, \theta_i) = \mathcal{H}(I_k) \ , \tag{9.93}$$

且新旧变量间由正则变换联系, 相应的正则变换的生成泛函仍记为 $W(\theta_k, I_k)$.

当频率比是有理数时, 可以证明, 由于共振, 生成泛函 $W(\theta_k, I_k)$ 会发散, 因而不能再用微扰论来求解, 或者说, 不变环面会因共振而破裂.

当频率比是无理数时, 对于无理环面的变化情况, 有 KAM 定理①, 其主要内容为:

假定未受微扰体系满足非退化条件

$$\det\left(\frac{\partial^2 H_0}{\partial J_i \partial J_k}\right) \neq 0 \ . \tag{9.94}$$

则当 $\epsilon \neq 0$ 但仍充分小时, 相空间中绝大部分无理环面经微扰后仅发生光滑形变, 即体系在这些变形的环面 (称为 KAM 环面) 上保持其原有的准周期运动.

满足 KAM 定理的体系称为近可积体系. 当体系未受微扰时, 有理环面在相空间处处稠密, 但所占测度为零; 当逐渐加入微扰后, 有理环面由于各运动模式间的共振, 原来的有理环面消失. 当有理环面破裂后, 微扰对体系运动的影响就只有通过无理环面的变化才能显示出来.

对于近可积非线性体系, 频率比 $\alpha = \dfrac{\omega_1}{\omega_2}$ 与作用变量 J_1 有关, 这时, 非线性效应将使得震荡频率随振幅而改变, 因此非线性项是一种使运动保持稳定的因素. 若体系满足非退化条件 (9.94) 式, 则频率依赖于作用变量, 即 $\dfrac{\partial \omega_i}{\partial J_k} \neq 0$, 那么只要频率比充分无理

$$\left|\frac{\omega_1}{\omega_2} - \frac{r}{s}\right| > \frac{\mu(\epsilon)}{s^{2.5}} \ , \tag{*}$$

其中, r, s 为相对互素整数, 则由 KAM 定理可以证明, 这时生成泛函 $W(\theta_k, I_k)$ 的重叠微扰级数收敛 (对于充分小的 ϵ), 所以无理环面并未破裂.

以上分析表明, 共振会导致微扰论不再适用, 而非线性效应是一种使近可积体系运动保持稳定的主要因素. 因此, KAM 定理揭示了可积哈密顿体系的规则运动对微扰的稳定性, 给出了无理环面得以保存的充分条件. 当微扰逐渐增强, 导致最后一个 KAM 环面破裂后, 体系便形成混沌运动. 换言之, 非线性共振导致了混沌运动, 进而导致了体系长期行为的不可预测性.

不动点定理与不变环面的破裂　为了更好地分析 KAM 环面的破裂与形成, 弄清相空间轨道的整体特性, 以及其与运动的局域光滑流形间的关系, 下面介绍 Poincare 截面, 利用它来分析不变环面的破裂及混沌的形成.

① 1954 年 A. N. Kolmogorov 提出重要定理, 后被 V. I. Arnold 及 J. K. Moser 分别予以证明. 见: Lichtenberg A J, Liebermann M A. 1983. Regular and Stochastic Motion. New York: Springer-Verlag.

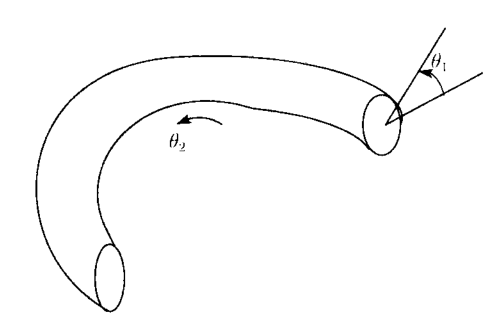


图 9.2 Poincare 截面

仍以 (9.91) 式描述的二维近可积哈密顿体系为例, 固定能量 E 使体系在相空间中的运动由四维降到三维, 用 θ_1, θ_2, J_1 作为等能面 $H=E$ 上坐标. 现在, 我们在三维等能面内选一个二维截面, 如 $\theta_2 = c$ 的截面, 称为 Poincare 截面 (图 9.2). 如果运动是有界的, 则运动轨道会重复穿过此截面, 下面来研究运动轨道从某一方向每次穿过该截面时产生的交点的轨迹.

我们先来分析 $\epsilon = 0$ 时 Poincare 截面上的映射. 在给定的等能面中取 $\theta_2 =$ 常数的 (J_1, θ_1) 截面作为 Poincare 面, 轨道与该截面的交点处于 $J_1 =$ 常数的圆上. 一根轨道相继两次穿越该截面的时间间隔为 $\boldsymbol{\Delta} t = \dfrac{2\pi}{\omega_2}$, 所以角变量 θ_1 在相继两次穿越该截面的改变量为

$$\omega_1 \boldsymbol{\Delta} t = 2\pi \frac{\omega_1}{\omega_2} = 2\pi\alpha.$$

因此, Poincare 截面上点的运动由二维映射 T 给出, 即

$$T\begin{pmatrix} J_1 \\ \theta_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} J_1 \\ \theta_1 + 2\pi\alpha \end{pmatrix},$$

其中, 频率比 $\alpha = \dfrac{\omega_1}{\omega_2}$ 也称作旋转数或扭转度. 若体系是非线性的, 则 α 的值还依赖作用变量 J_1, 即 $\alpha = \alpha(J_1)$.

在 Poincare 截面上用作用-角变量作为极坐标 $\rho = J_1, \varphi = \theta_1$, 并重复使用二维映射 T, 例如,

$$T\begin{pmatrix} \rho_0 \\ \varphi_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_1 \\ \varphi_1 \end{pmatrix}, \quad \begin{aligned} &\rho_1 = \rho_0 \\ &\varphi_1 = \varphi_0 + 2\pi\alpha(\rho_0) \ . \end{aligned}$$

当频率比 α 为有理数时 $\alpha(\rho_0) = \dfrac{r}{s}, r, s$ 为互素的整数, 则半径为 ρ_0 的圆上的每一点都将是 s 次二维映射 T^s 的固定点, 即

$$T^s\begin{pmatrix} \rho_0 \\ \varphi_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_s \\ \varphi_s \end{pmatrix}, \quad \begin{aligned} &\rho_s = \rho_0 \ , \\ &\varphi_s = \varphi_0 + 2\pi\frac{r}{s}\cdot s = \varphi_0 \quad (\mathrm{mod}\ 2\pi) \ . \end{aligned}$$

因此, 未受扰动时 $\alpha(\rho_0)=\dfrac{r}{s}$ 的有理环面 (周期轨道面) 与 Poincaré 截面的交线 C 是周期为 s 的那些轨道所给出的曲线 (图 9.3). 令 C_+, C_- 为两个频率比为无理数时的那些轨道给出的曲线, 则在映射 T^s 作用下, 周期性轨道所给出点 (即 C 上的点) 全为不动点, 而 C_+, C_- 上的点将沿相反方向移动.

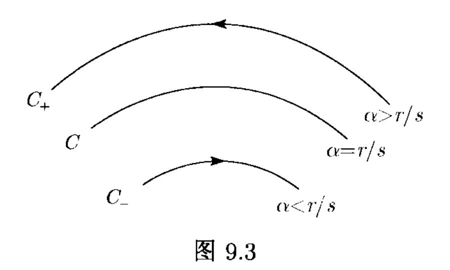


图 9.3

现在再来看 $\epsilon\neq 0$ 的情况. 当对体系加以微小扰动, Poincaré 截面上的二维映射变为

$$T_\epsilon\begin{pmatrix}\rho_0\\ \varphi_0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\rho_1\\ \varphi_1\end{pmatrix},\quad \begin{array}{l}\rho_1=\rho_0+\epsilon f(\rho_0,\varphi_0)\ ,\\ \varphi_1=\varphi_0+2\pi\alpha(\rho_0)+\epsilon g(\rho_0,\varphi_0)\ .\end{array}$$

当微扰足够弱, 且无理环面的扭转度 α 距有理数足够远, 如 (*) 式所示, 则相应的 KAM 曲面将保持其拓扑结构, 只是相对未受扰曲面略加变形. 对于原来的有理环面, 其在 Poincare 截面上的交线上的每一点, 都是映射 T^s 的不动点. 虽然加以扰动后, 这些不动点在 T_ϵ 变换下的变化情况, KAM 定理并未说明, 但是这时可用 Poincare-Birkhoff 定理[1] 来说明原来有理环面变化特点.

Poincare-Birkhoff 不动点定理　对于原扭转度为 $\alpha=\dfrac{r}{s}$ 的有理环面, 在受扰扭映射下, 仍具有 $2ks$ 个固定点, 其中 ks 个为椭圆点, ks 个为双曲点, 它们交替出现.

事实上, 在变换 T_ϵ^s 的作用下, 对于 C 外部的环面 $\alpha>\dfrac{r}{s}$, 其上的点逆时针转动, 记为 C_+; 对于 C 内部的环面 $\alpha<\dfrac{r}{s}$, 其上的点顺时针转动, 记为 C_-. 因此在 C_+ 与 C_- 之间总存在一条在 T_ϵ^s 变换下角度不变的曲线 R_s, 且在 T_ϵ^s 作用下 R_s 上的点仅作径向移动, 如图 9.4 所示. 由于 T_ϵ^s 是保面积的, 因此 R_s 与 $T_\epsilon^s R_s$ 必定相交于偶数个点. 即如果 x 点为一交点, 满足 $T_\epsilon^s x=x$, 则 $T_\epsilon^i x(i=1,\cdots,s-1)$ 也是 T_ϵ^s 作用下的不动点. 因此存在 $2ks$ 个不动点, 也就是说, 在原来的周期轨道附近, 当加微扰后, 原来的不变环面仍存在偶数个不动点.

为了弄清楚在固定点周围邻近各点的运动走向, 同时为方便起见, 把所考虑的不动点取为 Poincare 截面的原点, 分析其邻近点在 T_ϵ^s 作用下的行为.

① Birkhoff G D. 1935. Mem. Pont. Acad. Sci. Novi. Lyncaei, (1): 85~216

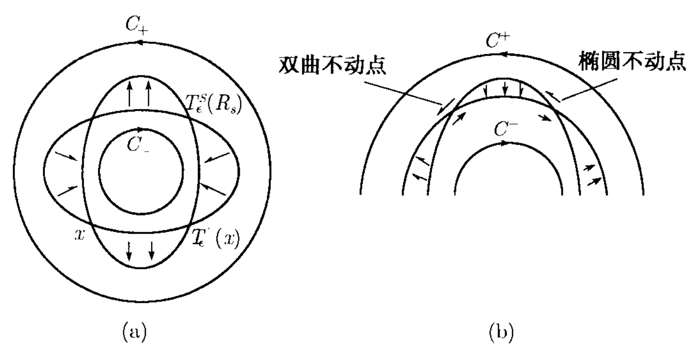


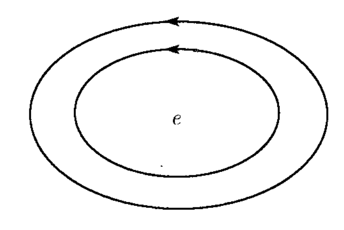
图 9.4

假定 ϵ 很小但非零, 并仅分析其线性项. 由于 T_ϵ^s 是实的保面积变换, 则 T_ϵ 变换矩阵的本征值 λ_1, λ_2 有两种可能:

(1) λ_1, λ_2 为相互共轭复数

$$\lambda_1 = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\chi}, \quad \lambda_2 = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\chi}, \quad \chi \text{为实数} .$$

这时不变曲线是椭圆型的, 相应的不动点称为椭圆不动点. 此时的 KAM 环面是稳定的, 即不变环面不破裂.



(2) λ_1, λ_2 为互逆实数

$$\lambda_i = \mathrm{e}^{\pm\chi}, \quad \text{或} \quad \lambda_i = -\mathrm{e}^{\pm\chi} .$$

这时不变曲线是双曲线型的, 相应的不动点称为双曲不动点, 此时的 KAM 环面是不稳定的, 即不变环面会破裂.

Lyapunov 指数与混沌运动 每个双曲不动点 h 有四条分界线 (separatrix). 其中两条曲线的指向在正映射 T_ϵ^s 作用下趋往不动点 h, 记为 H^+; 另外两条曲线的指向则在逆映射 T_ϵ^{-s} 作用下趋往不动点 h, 记为 H^-. 离开不动点 h 的分界线, H^- 与进入自身或相邻双曲不动点 h' 的 H^+ 有可能相交, 交点称为同宿点 (homoclinic) 或 异宿点 (heteroclinic). 若 x 为同 (异) 宿点, 则 $T_\epsilon^{ns}x(n = \pm1, \pm2, \cdots)$ 也是同 (异) 宿点. 由于 T_ϵ^s 具有保面积特性, H^- 与 H^+ 相继两次相交时所包围的面积为定值, 这将使得 H^- 在 h' 附近的振荡幅度越来越大, 同时运动轨迹被限制在有限

区域内. 因而在每个双曲不动点及其分界线附近的轨道, 运动的长期行为类似于随机运动, 即会导致混沌运动. 所以, 在近可积体系的相空间中, 规则区与混沌区交错并存 (图 9.5).

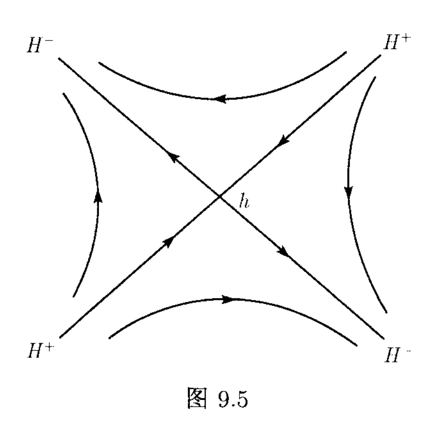


图 9.5

当微扰增强时, 更多的光滑不变环面被破坏, 直到最后一个 KAM 环面被破坏就会导致全局混沌 (图 9.6).

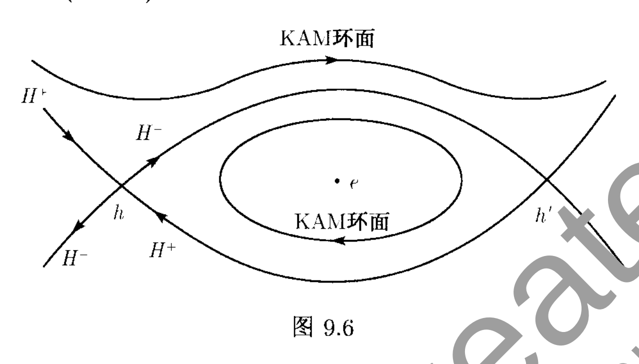


图 9.6

非线性共振可以导致哈密顿体系中的混沌现象, 导致运动轨迹的长期行为的不可预测性, 亦即运动对初值的敏感性. 对于具有指数型的局域不稳定性, 可用 Lyapunov 特性指数 λ 来标记, 即

$$|\delta x(t)| \approx |\delta x(t_0)| \mathrm{e}^{(t-t_0)\lambda},$$

$$\lambda = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t-t_0} \ln\left(\lim_{|\delta(x(t_0))|\to 0} \frac{|\delta x(t)|}{|\delta x(t_0)|} \right) . \tag{9.95}$$

当 λ 为正, 标志不稳定. 注意, (9.95) 式中双重极限运算不可置换. 因此, 动力学体系有混沌现象的充要条件是: 有足够多的正的 Lyapunov 指数的有界轨道, 使其在相空间中的维数大于一.

对于 N 个自由度的哈密顿体系, 假定时间为 t_0 时, 在相空间中有无穷小偏离

$\mathbf{\Delta}x(t_0)$, 当体系沿给定轨道运动到时间为 t 时的偏离 $\mathbf{\Delta}x(t)$ 变为

$$\mathbf{\Delta}x(t) = M(t,t_0)\mathbf{\Delta}x(t_0) \ ,$$

其中, $M(t,t_0)$ 为由体系哈密顿量决定的 $2N \times 2N$ 维的相空间正则变换矩阵, 而 Lyapunov 指数 λ 可由矩阵 $M(t,t_0)$ 的任意模 (Norm)$\mu(t,t_0)$ 来定义, 即

$$\lambda = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t-t_0} \ln \mu(t,t_0) \ .$$

由上式定义的 Lyapunov 指数是经典轨道的函数, 对于同一给定轨道上的所有点都具有相同的 Lyapunov 指数. 周期轨道的 Lyapunov 指数很容易计算, 只需分析一个周期 T 的矩阵 $M(T,0)$. 令 β 为 $M(T,0)$ 具有最大绝对值的本征值, 则此周期轨道的 Lyapunov 指数为

$$\lambda = \frac{1}{T} \ln |\beta| \ .$$

对于在 Poincare 截面上的椭圆固定点, 若有一稳定周期轨道通过, 则相应的 $\beta = \mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}\alpha}$, α 为频率比, 所以 $|\beta| = 1$, $\lambda = 0$, 运动轨道稳定. 但对于在 Poincare 截面上的双曲固定点, 一般有 $|\beta| > 1$, $\lambda > 0$, 即通过的轨道不稳定.

9.5 量子态密度的路径积分表达式

动力学体系的路径积分量子化能够明确地显示出量子力学体系与经典力学间的联系. 在本节, 将通过路径积分的稳相近似方法建立起经典轨道的拓扑性质与体系量子化特性的初步关系.

量子态密度的半经典近似 对于保守体系, 哈密顿量与时间无关, 费恩曼传播函数仅依赖时间差 $T = t_b - t_a$, 即

$$\begin{aligned} K(x_b,x_a;t) &= \langle x_b| \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}t\right)|x_a\rangle \\ &= \sum_j \psi_j^*(x_a)\psi_j(x_b)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_j t} , \end{aligned} \tag{9.96}$$

其中, E_j 和 ψ_j 为 $\hat{H}$ 的本征值与本征态. 对 (9.96) 式乘以 $\Theta(t)$ 后作傅里叶变换, 得定态格林函数

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(x_b,x_a;E) &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}K(x_b,x_a;t)\Theta(t) \\ &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\lim_{\varepsilon\to0^+}\int_0^{\infty}\mathrm{d}t\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(E+\mathrm{i}\epsilon)t}K(x_b,x_a;t) \\ &= \lim_{\epsilon\to0^+}\sum_j \frac{\psi_j^*(x_a)\psi_j(x_b)}{E-E_j+\mathrm{i}\epsilon} \ . \end{aligned} \tag{9.97}$$

在第二步的运算中利用了 iϵ 正则化技术, 这样可将能谱由实轴延拓到复平面, 并利用回路积分计算能谱. 我们将重点讨论量子态密度的路径积分表达式, 为此, 将 (9.97) 式对坐标取迹, 可得量子态密度的迹等式

$$\rho(E)=\sum_j \delta(E-E_j)=-\frac{1}{\pi}\int \mathrm{d}x \mathrm{Im}\mathcal{G}(x,x;E) \ . \tag{9.98}$$

现在来研究 (9.98) 式的半经典近似 —— 路径积分稳相近似, 我们曾经导出费恩曼传播函数的半经典表达式 (Vlech 公式)

$$K_{sc}(x_b,t_b;x_a,t_a)=\left(\frac{1}{\mathrm{i}2\pi\hbar}\right)^{\frac{D}{2}}\sum_\gamma\left[\det\left(-\frac{\partial^2 S_\gamma}{\partial x_b^j\partial x_a^k}\right)\right]^{\frac{1}{2}} \times\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S_\gamma(x_b,t_b;x_a,t_a)-\mathrm{i}\frac{\pi}{2}\nu_\gamma\right) \ . \tag{9.99}$$

通过傅里叶–拉普拉斯 (Fourier-Laplace) 变换可得格林函数的半经典表达式

$$\mathcal{G}_{sc}(x_b,x_a;E)=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^\infty \mathrm{d}t\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}K_{sc}(x_b,x_a;t) \ , \tag{9.100}$$

再对坐标取迹, 即得态密度的半经典表达式

$$\rho_{sc}(x_b,x_a;E)=\frac{1}{\pi\hbar}\int_{-\infty}^\infty \mathrm{d}x\int_0^\infty \mathrm{d}t\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}K_{sc}(x,x;t) \ . \tag{9.101}$$

我们的讨论将从 (9.101) 式出发. 对于保守体系, 能量守恒. 那么, 在时间间隔 $t=t_b-t_a$ 由 $x_a\to x_b$ 的路径的作用量

$$S_{ab}=S(x_b,t_b;x_a,t_a)=\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t(p\dot{x}-H)=W(x_b,x_a;E)-Et \tag{9.102}$$

它与在固定能量 E 下的由 $x_a\to x_b$ 的作用量泛函 $W(x_b,x_a;E)$ 间的关系为

$$W_{ab}=W(x_b,x_a;E)=\int_{x_a}^{x_b}\mathrm{d}xp=S(x_b,x_a;t)+Et \ . \tag{9.103}$$

$W(x_b,x_a;E)$ 也称为作用量特性函数 (简称作用函数), S_{ab} 与 W_{ab} 之间相当于作勒让德变换改变了变量: $t\leftrightarrow E$

$$p_b=\frac{\partial S_{ab}}{\partial x_b}=\frac{\partial W_{ab}}{\partial x_b},\quad t=\frac{\partial W_{ab}}{\partial E} \ ,$$
$$p_a=-\frac{\partial S_{ab}}{\partial x_a}=-\frac{\partial W_{ab}}{\partial x_a},\quad E=-\frac{\partial S_{ab}}{\partial t} \ . \tag{9.104}$$

先分析最简单的情形, 考虑短核公式, 假设在 $(x_a, t_a) \to (x_b, t_b)$ 仅有一条经典路径, 相应的哈密顿主函数

$$S(x_b, t_b; x_a, t_a) = \int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t (p\dot{x} - H)|_{x=x_c} \equiv S_{ab} \ , \tag{9.105}$$

因此

$$\mathcal{G}(x_b, x_a; E) = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left(\frac{1}{2\pi\mathrm{i}\hbar}\right)^{\frac{D}{2}} \int_0^\infty \mathrm{d}t \left[\det\left(-\frac{\partial^2 S_{ab}}{\partial x_b^j \partial x_a^k}\right)\right]^{\frac{1}{2}} \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[S(x_b, x_a; t) + Et]\right\}. \tag{9.106}$$

利用稳相条件, $\left.\dfrac{\partial S(x_b, x_a, t)}{\partial t}\right|_{t=t_c} = -E$, 即 $S(x_b, x_a, t_c) + Et_c = W(x_b, x_a, E)$. 采用稳相近似, 格林函数的半经典表达式为

$$\begin{aligned}\mathcal{G}_{sc}(x_b, x_a; E) =& \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left(\frac{1}{2\pi\mathrm{i}\hbar}\right)^{\frac{D}{2}} \left.\left[\det\left(-\frac{\partial^2 S_{ab}}{\partial x_b^j \partial x_a^k}\right)\right]^{\frac{1}{2}}\right|_{t_c} \\ &\times \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}W(x_b, x_a; E)} \int_0^\infty \mathrm{d}t \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2\hbar}\left.\frac{\partial^2 S_{ab}}{\partial t^2}\right|_{t_c}(t-t_c)^2} \\ =& \frac{1}{2\mathrm{i}\hbar}\left(\frac{1}{2\pi\mathrm{i}\hbar}\right)^{\frac{D-1}{2}} \left(\frac{\partial^2 S_{ab}}{\partial t^2}\right)^{-\frac{1}{2}} \left[\det\left(-\frac{\partial^2 S_{ab}}{\partial x_b^j \partial x_a^k}\right)\right]^{\frac{1}{2}} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}W(x_b, x_a; E)}. \end{aligned} \tag{9.107}$$

量子涨落因子的计算 为了计算 (9.107) 式中的量子涨落因子, 令 $t = t_b - t_a$ 固定, 设 p_a 在 n 维体积内的变分为 δp_a, 经典轨道由 x_a 出发, 终点 x_b 占据的体积元为 δx_b. 则易证雅可比矩阵 $\boldsymbol{J} \equiv \dfrac{|\delta x_b|}{|\delta p_a|}$ 的逆矩阵为

$$\boldsymbol{J}^{-1} = -\left(\frac{\partial^2 S_{ab}}{\partial x_b^j \partial x_a^k}\right) .$$

而且这时因为 t 保持固定, 利用勒让德变换 (9.104) 式可得

$$\frac{\partial t}{\partial x_a^j} = \frac{\partial^2 W_{ab}}{\partial E \partial x_a^j} + \frac{\partial^2 W_{ab}}{\partial E^2}\frac{\partial E}{\partial x_a^j} = 0. \tag{9.108}$$

因为在相空间固定能量 E 的面上沿 $x_a \to x_b$ 路径有

$$H(p_b, x_b) = H\left(\frac{\partial W_{ab}}{\partial x_b}, x_b\right) = E \ ,$$

将上式对初值坐标求导, 得

$$0 = \frac{\partial}{\partial x_a^i} H = \frac{\partial H}{\partial p_b^j}\frac{\partial^2 W_{ab}}{\partial x_a^i \partial x_b^j} \ .$$

上式表明 $D\times D$ 维矩阵

$$\boldsymbol{M}=\left(\frac{\partial^2 W_{ab}}{\partial x_a^i\partial x_b^j}\right)$$

具有本征值为零的本征矢 $\dfrac{\partial H}{\partial p_b^j}$, 所以

$$\det M=0\ . \tag{9.109}$$

再由勒让德变换 (9.104) 式知

$$\left(\frac{\partial^2 S_{ab}}{\partial t^2}\right)^{-1}=-\frac{\partial^2 W_{ab}}{\partial E^2}\ , \tag{9.110}$$

另外, 由于

$$\frac{\partial S_{ab}}{\partial x_a^j}=\frac{\partial W_{ab}}{\partial x_a^j}\ , \tag{9.111}$$

利用 (9.108) 式, 有

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 S_{ab}}{\partial x_b^j\partial x_a^k}&=\frac{\partial^2 W_{ab}}{\partial x_b^j\partial x_a^k}+\frac{\partial^2 W_{ab}}{\partial x_b^j\partial E}\frac{\partial E}{\partial x_a^k}\\&=\frac{\partial^2 W_{ab}}{\partial x_b^j\partial x_a^k}-\frac{\partial^2 W_{ab}}{\partial x_b^j\partial E}\frac{\partial^2 W_{ab}}{\partial E\partial x_a^k}\left(\frac{\partial^2 W_{ab}}{\partial E^2}\right)^{-1}\ .\end{aligned} \tag{9.112}$$

注意到 (9.109) 式, 易证由 (9.112) 式表示的复杂成员组成的 $D\times D$ 维矩阵 $\boldsymbol{J}^{-1}$ 的行列式, 可用无奇异性的 $(D+1)\times(D+1)$ 维的行列式 $\varDelta_{ab}(E)$ 来表示

$$\begin{aligned}\varDelta_{ab}(E)&=(-1)^{D+1}\det{}_{D+1}\begin{pmatrix}\dfrac{\partial^2 W_{ab}}{\partial x_b^j\partial x_a^k} & \dfrac{\partial^2 W_{ab}}{\partial x_b^j\partial E}\\ \dfrac{\partial^2 W_{ab}}{\partial E\partial x_a^k} & \dfrac{\partial^2 W_{ab}}{\partial E\partial E}\end{pmatrix}\\&=-\frac{\partial^2 W_{ab}}{\partial E^2}\det{}_D\left(-\frac{\partial^2 S_{ab}}{\partial x_b^j\partial x_a^k}\right)\end{aligned}$$

再利用 (9.110) 式可计算 (9.107) 式的量子涨落因子, 对于行列式为零的 $D\times D$ 矩阵, 可以构造一个行列式不为零的 $(D+1)\times(D+1)$ 矩阵. 例如, $D=2$ 时, 设 $\begin{vmatrix}a & b\\ c & d\end{vmatrix}=0$, 则可以构造一个 3×3 行列式.

$$\begin{aligned}\varDelta_{ab}(E)&=-\begin{vmatrix}a & b & u\\ c & d & v\\ x & y & z\end{vmatrix}=-\begin{vmatrix}a & b & u\\ c & d & v\\ x & y & 0\end{vmatrix}=-z\begin{vmatrix}a & b & u\\ c & d & v\\ x/z & y/z & 0\end{vmatrix}\\&=-z\left[\begin{vmatrix}b & u\\ d & v\end{vmatrix}x/z-\begin{vmatrix}a & u\\ c & v\end{vmatrix}y/z\right].\end{aligned}$$

另一方面,

$$\delta=\begin{vmatrix} a-ux/z & b-uy/z \\ c-vx/z & d-vy/z \end{vmatrix}=-\begin{vmatrix} a & uy/z \\ c & vy/z \end{vmatrix}-\begin{vmatrix} ux/z & b \\ vx/z & d \end{vmatrix}$$
$$=\begin{vmatrix} b & u \\ d & v \end{vmatrix}x/z-\begin{vmatrix} a & u \\ c & v \end{vmatrix}y/z$$

两式比较, 得

$$\Delta_{ab}(E)=-z\delta\ .$$

Morse 指数与闭合轨道的拓扑性质 进一步, 我们假定在固定能量 E 时, 由 $x_a\to x_b$ 可能有若干个经典轨道, 因此计算路径积分时还应对各个不同的经典轨道 $\{x_\gamma\}$ 的贡献来求和. 这样, 我们可将格林函数的半经典表达式最终表示为

$$\mathcal{G}_{sc}(x_b,x_a;E)=\frac{2\pi}{(2\pi\mathrm{i}\hbar)^{\frac{D+1}{2}}}\sum_\gamma\sqrt{(-1)^{D+1}\Delta_{ab}^\gamma}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}W_{ab}^\gamma-\mathrm{i}\frac{\pi}{2}\mu_\gamma}\ ,\tag{9.113}$$

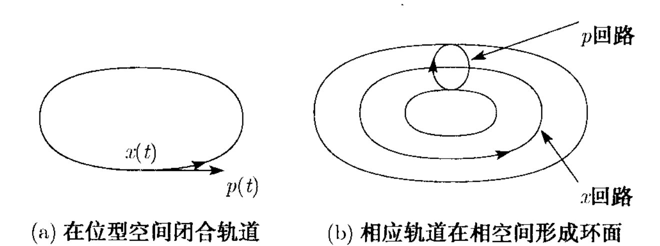
其中, 因子 $(-1)^{D+1}$ 是为了保证在方根下表达式对短轨道为正而引入的. (9.113) 式中的 μ_γ 是在固定能量 E 时, 由 $x_a\to x_b$ 的经典轨道 x_γ 上的共轭点的阶数和, 也称为 Morse 指数, 但它一般不同于指数 ν_γ. 后者标志着在固定时间间隔 t 内由 $x_a\to x_b$ 的轨道族的拓扑特征, 而前者 μ_γ 则取决于在固定能量 E 时联结 x_a,x_b 的轨道族的拓扑特征. 再对 (9.113) 式取迹, 我们便得到量子态密度的半经典表达式

$$\begin{aligned}\rho_{sc}(E)&=-\frac{1}{\pi}\int\mathrm{d}x\mathrm{Im}\mathcal{G}(x,x;E)\\&=\frac{2}{(2\pi\hbar)^{\frac{D+1}{2}}}\sum_\gamma\int\mathrm{d}^Dx|\Delta^\gamma(x,x;E)|^{\frac{1}{2}}\\&\quad\times\cos\left[\frac{1}{\hbar}W^\gamma(x,x;E)-\frac{\pi}{2}\left(\mu_\gamma+\frac{D-1}{2}\right)\right]\ .\end{aligned}\tag{9.114}$$

另一方面, 在稳相近似下, 要求相因子满足

$$\frac{\partial}{\partial x}W(x,x;E)=\frac{\partial W(x,x;E)}{\partial x_a}+\frac{\partial W(x,x;E)}{\partial x_b}\Big|_{x=x_a=x_b}=p_b-p_a=0\ ,\tag{9.115}$$

即稳相轨道为相空间中的闭合轨道. 经典相空间中的闭合轨道不仅要求起点、终点具有相同位置: $x_b=x_a=x$, 而且还要求具有相同的动量: $p_a=p_b$, 即它们必定为周期轨道, 而周期轨道相当于相空间中的环面, 如图 9.7 所示. 这时取迹运算, 相当于对所有周期轨道求和.



(a) 在位型空间闭合轨道　　(b) 相应轨道在相空间形成环面

图 9.7

路径积分与量子化条件　作为量子态密度的路径积分公式的应用举例, 在这里导出玻尔-索末菲量子化条件.

为简单起见, 讨论一维情况 (高维也可类似分析). 在相空间中, 闭合周期轨道的作用量函数为

$$
\begin{aligned}
W(E) &= \oint p\mathrm{d}x = \oint \mathrm{d}x\sqrt{2m(E-V(x))} \\
&= 2\int_a^b \mathrm{d}x\sqrt{2m(E-V(x))} = 2W_{ab}.
\end{aligned} \tag{9.116}
$$

由于

$$
\frac{\partial^2 W_{ab}}{\partial x_a \partial x_b} = 0\ ,
$$

$$
\frac{\partial^2 W_{ab}}{\partial x_a \partial E} = -\frac{m}{\sqrt{2m(E-V(x))}} = -\frac{\partial^2 W_{ab}}{\partial E \partial x_b}\ , \tag{9.117}
$$

所以

$$
\Delta(x,x;E) = \frac{m}{2(E-V(x))}\ . \tag{9.118}
$$

对于能量为 E 的 j 重周期轨道, 其 Maslov 指数

$$
W^j(x,x;E) = j\oint \mathrm{d}x\sqrt{2m(E-V(x))} = jW(E)\ . \tag{9.119}
$$

因此一维体系 ($D=1$) 的量子态密度为

$$
\rho_{sc}(E) = \frac{1}{\pi\hbar}\int_a^b \mathrm{d}x\left(\frac{m}{2[E-V(x)]}\right)^{\frac{1}{2}}\cos\left(j\frac{W(E)}{\hbar}-\pi\right)\ . \tag{9.120}
$$

又因为

$$
\frac{\partial W(E)}{\partial E} = \int_a^b \mathrm{d}x\frac{2m}{\sqrt{2m(E-V(x))}}\ ,
$$

并利用泊松求和公式

$$
\sum_j \cos(2\pi jx) = \sum_n \delta(x-n)\ .
$$

可以求得

$$\begin{aligned}\rho_{sc}(E) &= \frac{1}{2\pi\hbar}\frac{\partial W(E)}{\partial E}\sum_n \delta\left(\frac{W(E)}{2\pi\hbar}-\frac{1}{2}-n\right)\\ &= \frac{\partial W(E)}{\partial E}\sum_n \delta\left(W(E)-\left(n+\frac{1}{2}\right)2\pi\hbar\right)=\sum_n \delta(E-E_n)\ .\end{aligned}$$

在上式的最后一步运算中利用了公式

$$\delta(f(x))=\sum_n \frac{\delta(x-x_n)}{|f'(x_n)|}\ ,$$

故有

$$\int_a^b \mathrm{d}x\sqrt{2m(E-V(x))}=\frac{1}{2}W(E)=\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi\hbar\ .$$

上式便是用稳相近似路径积分方法得出的玻尔–索末菲量子化条件.

9.6　量子不可积性 (量子混沌), 强电磁场中的 Rydberg 原子

量子可积与不可积体系　量子力学的数学结构是线性的. 因此, 如何理解量子动力学的非线性效应, 特别是如何用量子力学分析研究微观体系中的非线性现象, 是当前物理学界的重大课题之一. 前面的讨论表明, 动力学对称群可以用来分析判断动力学体系是否可积, 动力学对称性的破缺可导致量子相空间中的结构相变, 导致量子体系不可积. 本节将简要说明非线性现象中量子涨落的动力学效果可能导致混沌现象.

对于有限维量子力学体系, 可以类似于刘维尔关于经典力学体系可积性的定义, 来给出量子力学体系的可积定义. 例如, 对于有 N 个动力学自由度的量子力学体系, 必须有 N 个相互交换的力学量完备集 $\{I_i,\ i=1,\ 2,\cdots,N\}$, 其中包含体系的哈密顿量 H, 满足

$$[I_i,I_j]=0.$$

这 N 个交换算子称为运动积分, 它们具有共同的本征态, 具有 N 个好量子数:

$$I_i|\lambda\rangle=\lambda_i|\lambda\rangle,$$

体系的能谱为 $\{\lambda_i\}$ 的函数. 这样, 即可定义量子可积性:

具有 N 个独立动力学自由度的量子力学体系, 当存在 N 个相互交换的运动积分, 即体系具有相互交换的力学量完备集 CSCO(complete set of communicating operator), 则体系可积.

对于量子可积体系, 则常可找到相互交换力学量完备集, 在以它们的本征值 (称为好量子数) 相应的本征态构成的基底的态空间中, 使得体系的哈密顿量可对角化.

量子动力学体系的动力学对称决定着该体系的动力学行为, 对具有 N 个自由度的量子可积保守体系, 必存在 N 个独立的和相互对易的守恒量 I_j, 且 I_j 必为动力学群的某一子群链的 Casimir 算子. 使 $\{I_i\}_1^N$ 共同本征态按其不可约表示实现.

量子体系的不可积性表现于动力学对称破缺. 在原子分子物理、核物理、凝聚态物理、介观物理等领域中存在许多量子不可积性问题, 对于这些难于用常规量子力学方法求解的强不可积问题, 目前最有效的手段就是用路径积分相干态表述方法. 在稳相近似下, 首先对体系经典动力学运动及其稳定性问题进行分析, 然后再进行量子涨落分析, 这是当前量子力学研究前沿的新领域.

例如, 高激发态氢原子的微波电离和量子局域化及去局域效应 (delocalization). 1905 年爱因斯坦对光电效应的分析发现单光子的电离具有明显的频率阈值. 而 1974 年 Bayfield 和 Koch① 发现高激发氢原子在强辐射场中的微波电离具有明显的场强阈效应, 并被解释为原子中的电子在非线性共振响应下出现的大范围混沌扩散, 因而产生多光子电离. 1978 年 Leopold 和 Perival②用相空间中的微分正则分布模拟了高激发态氢原子束的初始状态, 并用蒙特卡罗方法对相空间轨迹进行数值计算, 肯定了多光子电离现象与经典混沌的联系, 得出的电离率与实验符合的很好.

强磁场中的氢原子　下面简单介绍在强磁场中氢原子高激发态能谱及电离问题.

Rydberg 原子具有高量子数态, 可进行半经典分析. 在均匀静磁场中的氢原子③, (暂不考虑电子自旋), 其哈密顿量

$$H = \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{p} + \frac{\boldsymbol{A}}{c}\right)^2 - \frac{1}{r}, \tag{9.121}$$

其中, $\boldsymbol{A}$ 为矢势, 对于均匀磁场 $\boldsymbol{B}$, 可选

$$\boldsymbol{A} = \frac{1}{2}\boldsymbol{B} \times \boldsymbol{r},$$

满足

$$\nabla \times \boldsymbol{A} = \boldsymbol{B}$$

① Bayfield J E, Koch P M. 1974. Phys. Rev. Lett., (33): 258.
② Leopold J G, Perival I C. 1978. Phys. Rev. Lett., (41): 944.
③ 1. Frieduch H, Wintgen D. 1989. The hydrogen atom in a uniform magnetic field-an example of chaos. Phys. Rep., (183): [illegible]~39.
2. 顾燕. 1996. 量子混沌. 上海: 上海科技出版社.
3. Cvotanovie P, et al. Classical and quantum chaos. http://www. nbi. dk/ChaosBook/ .
4. Du M L, Delos J B. 1988. Effect of closed orbits on quantum spectra, ionization of atoms in a magnetic field. Phys. Rev. A, (38)1896.

及条件

$$\nabla \cdot \boldsymbol{A} = 0.$$

设均匀磁场 $\boldsymbol{B}$ 沿 z 轴方向, 可选

$$A_x = -\frac{B}{2}y, \quad A_y = \frac{B}{2}x, \quad A_z = 0.$$

引进量纲为一参数 $\gamma = \dfrac{B}{B_0}$, $B_0 = \dfrac{m^2 e^3 c}{\hbar^3} \sim 2.35 \times 10^5\text{T}$. 并采用柱坐标 (ρ, φ, z), 则相应的正则动量为

$$p_\rho = \dot{\rho}, \quad p_z = \dot{z}, \quad p_\varphi = \rho^2 \dot{\varphi} - \frac{\gamma \rho^2}{2},$$

哈密顿量 (9.121) 可表示为

$$H = \frac{1}{2}\left(p_\rho^2 + \frac{p_\varphi^2}{\rho^2} + p_z^2\right) - \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} + \frac{\gamma}{2}p_\varphi + \frac{\gamma^2}{8}\rho^2. \tag{9.122}$$

将定态薛定谔方程的波函数记为

$$\Psi(\rho, \varphi, z) \equiv \psi(\rho, z)\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi},$$

满足

$$\left[\frac{1}{2}\left(-\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial \rho}\rho\frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{m^2}{\rho^2}\right) - \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} + \frac{m}{2}\gamma + \frac{\gamma^2}{8}\rho^2\right]\psi(\rho, z) = E\psi(\rho, z). \tag{9.123}$$

此哈密顿量对绕 z 轴转动和对 xy 平面反射不变, 故角量子数 m 及相对 z 轴反射宇称 π 均为好量子数, 且左端第三项 (塞曼项) 为常数 $\frac{m}{2}\gamma$, 相当于定态能级平移, 因此, 需要重点分析的物理问题是粒子在 2 维势 $V(\rho, z)$ 中运动.

$$\left[\frac{1}{2}\left(-\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial \rho}\rho\frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V(\rho, z)\right]\psi(\rho, z) = \left(E - \frac{m}{2}\gamma\right)\psi(\rho, z), \tag{9.124}$$

其中,

$$V(\rho, z) = \frac{1}{8}\gamma^2\rho^2 + \frac{m^2}{2\rho^2} - \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} \tag{9.125}$$

仅当: ① $\gamma = 0$ 为氢原子体系精确可解; ② γ 很大时, 库仑项 (上式最后一项) 可忽略, 相当于外场中自由电子, 精确可解. 在一般情况下, 此方程不能用分离变量法求解, 只能在磁场很弱或很强时的极限情况下, 用微扰方法可得近似解. 下面分析讨论:

弱磁场极限与塞曼能谱　在弱场情况下, 可忽略抗磁项, (9.125) 式右端第一项, 这时体系为 $SO(4)$ 对称的氢原子, 力学量完全集 $(H, \boldsymbol{L}^2, L_z)$ 为守恒量, (n, l, m) 为好量子数, 是可积体系, 这时能量的本征值可表示为 (用 $\mathrm{Ryd} = \dfrac{me^4}{2\hbar^2}$ 为能量单位)

$$E_{n,m} = -\frac{1}{2n^2} + \frac{m}{2}\gamma, \tag{9.126}$$

此即熟知的简单塞曼效应.

当 $\gamma \neq 0$, 体系不可积, 需考虑抗磁项的微扰作用, 当抗磁项 $\gamma^2 n^4/8$ 小于能级间距 n^{-3}, 不同 n 能级间耦合可略去, 这时 n 仍是一个好量子数, 但 l 已不是, 这一能区称 l 混合区. 这时, 守恒量除 E, L_z 外, 还有一个准确到 γ^2 的近似守恒量

$$\boldsymbol{\Sigma} = 4\boldsymbol{A}^2 - 5A_z^2 = 4(A_x^2 + A_y^2) - A_z^2, \tag{9.127}$$

其中

$$\boldsymbol{A} = \frac{1}{\sqrt{-2\hbar mE}}\left[\boldsymbol{P} \times \boldsymbol{L} - \frac{me^2}{r}\boldsymbol{r}\right]$$

为 Runge-Lenz 矢量.

对 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的具有正本征值 k 的本征态, 算子 $\boldsymbol{\Lambda} = (A_x, A_y, L_z)$ 具有近似 $O(3)$ 对称, $\boldsymbol{\Lambda}^2$ 本征值 $\lambda(\lambda+1)$ 的本征态, 称为转子态. 相应本征态可用 (n, k, m) 来标记, $\lambda = n - 1 - k$. 相应的 k 由 0(当 $\pi = +1$) 或 1 (当 $\pi = -1$) 增加到其最大值 $n - |m| - 1$. 抗磁微扰项导致能级移动为

$$\boldsymbol{\Delta} E^{rot} = \frac{1}{16}\gamma^2 n^2\left(\frac{9}{2}\lambda(\lambda+1) + \frac{1}{2}n^2 - 3m^2 + \frac{\lambda^2}{4}\right). \tag{9.128}$$

对 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的具有负本征值 s 的本征态, 近似具有 $O(2) \times O(2)$ 对称, 相当于二维耦合非线性振子, 称为振子态. 相应的本征态仍用 (n, k, m) 来标记, $k = n - |m| - s$. 逆磁项导致振子态能级的移动为

$$\boldsymbol{\Delta} E^{rib} = \frac{1}{16}\gamma^2 n^2[(2\sigma + |m| + 1)2\sqrt{s}n - 3(2\sigma + |m| + 1)^2 - m^2 + 1] \tag{9.129}$$

其中, $\sigma = \dfrac{1}{2}(s-1)$(或 $= \dfrac{1}{2}(s-2)) = 0, 1, 2, \cdots$.

当主量子数为 $n+1$ 的多重态中的最低振子态 $(\sigma = 0)$ 与主量子数为 n 的多重态中最高转子态 $(\lambda = n - 1$ 或 $n - 2)$ 的能级重合时, 系统进入 n 混合区. 当能量接近电离阈 $E = 0$ 时, n 和 l 都不再是好量子数, 这时以 Rydberg 态为基态的微扰理论也就失效.

强磁场极限与朗道能谱　当 (9.123) 式中库仑项 ((9.125) 式中最后一项) 可忽略, 则方程可对坐标 ρ, z 分离变量, 可令 $\psi(\rho, z) = \Phi(\rho)\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_z z}$, 则径向波函数 $\Phi(\rho)$ 满

足

$$\left[\frac{1}{2}\left(-\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{m^2}{\rho^2}\right)+\frac{1}{8}\gamma^2\rho^2\right]\varPhi(\rho)=\left(E-\frac{m}{2}\gamma-\frac{1}{2}p_z^2\right)\varPhi(\rho) \tag{9.130}$$

相当于自由电子在垂直磁场平面做圆周运动, 其能量本征值为

$$E=E_{Nm}+\frac{1}{2}p_z^2,$$
$$E_{Nm}=\left(N+\frac{1}{2}+\frac{m}{2}+\frac{|m|}{2}\right)\gamma,$$
$$N=0,1,2,\cdots,$$

此离散谱称为朗道 (Landau) 谱.

当考虑库仑项微扰作用时, 可将波函数 $\psi(\rho,z)$ 按 (9.130) 式的径向朗道态 $\varPhi_{Nm}(\rho)$ 展开

$$\psi(\rho,z)=\sum_{N\geqslant 0}\varPhi_{Nm}(\rho)\psi_N(z), \tag{9.131}$$

带入 (9.123) 式得到一组由不同朗道通道波函数 $\psi_N(z)$ 的耦合方程

$$\left(\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2}-N\gamma+(E-E_m)\right)\psi_N(z)-\sum_{N'}V_{NN'}^m(z)\psi_{N'}(z)=0, \tag{9.132}$$

其中, $E_m=\dfrac{1}{2}(|m|+1)\gamma$ 为最低朗道能级的零点能, 是在 m^π 子空间的游离阈. 式中微扰项

$$V_{NN'}^m(z)=\int_0^\infty \mathrm{d}\rho\rho\varPhi_{Nm}(\rho)\frac{-1}{\sqrt{\rho^2+z^2}}\varPhi_{N'm}(\rho)$$

不依赖方位角量子数 m 的符号, 使各朗道通道波函数间发生耦合.

当 $\gamma>1$ 时, $N>0$ 通道中的各离散谱都在其相应最低电离阈之上, 都是一些能自发电离的束缚态, 只有 $N=0$ 通道中 Rydberg 序列才为真正束缚态. 当磁场强度从 $\gamma=1$ 附近往下减时, 不同朗道通道开始重叠, 在 $\gamma\approx 0.3$ 附近, $N=1$ 通道中最低共振态越过电离阈 E_m, 破坏了原来在最低朗道能级的 Rydberg 序列. 当 γ 再减小时, 更多朗道通道重叠, 使能谱结构愈来愈复杂.

任意场时体系的可积性分析 除了在弱磁场和强磁场两种情况外, 在一般情况下, 磁场中的氢原子能谱结构十分复杂, 很难用量子微扰理论给与简单解释.

1969 年, Gaston 和 Tomkins[①]测得钡原子在不同外磁场强下的吸收谱, 如图 9.8 所示, 在电离阈附近发现一列间隔为 1.5γ 的共振吸收峰. 此震荡结构 Edmonds 称为准朗道谱.

① Gaston W R S, Tomkins F S. 1969. Astro. Phys.J., (158): 839.

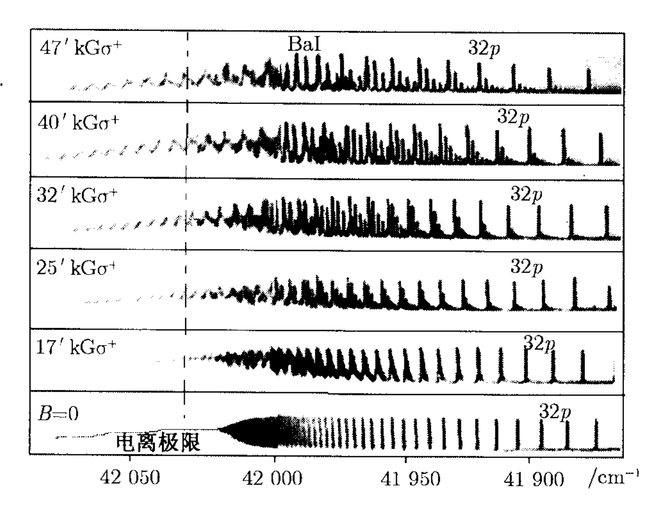


图 9.8 钡原子在外磁场中的吸收谱

1971 年 Gutzwiller 提出周期轨道理论, 利用路径积分的半经典近似给出了量子态密度的迹公式. 这种分析方法已在原子分子光谱中得到广泛应用, 特别是, 由光谱测量判断电子轨道的周期与经典作用量, 进而分析这些轨道的产生与分岔, 分析体系动力学有序及混沌的变化, 已经成为当前研究前沿课题. 为说明其特点, 下面先简单分析一下在磁场中氢原子体系经典动力学的特点, 周期轨道的产生与分岔, 轨道的初始条件敏感性与 Lyapunov 指数. 然后再讨论相应量子理论与实验的比较.

磁场中氢原子的动力学分析 为建立经典与量子动力学间联系, 先认真分析在相空间经典轨道结构. 在磁场中氢原子体系哈密顿量具有标度不变性

$$H(\alpha^2 \boldsymbol{r}, \alpha^{-1}\boldsymbol{p}, \alpha^3 t) = \alpha^{-2} H(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, t).$$

作标度变换

$$\tilde{\boldsymbol{r}} = \gamma^{\frac{2}{3}}\boldsymbol{r}, \quad \tilde{\boldsymbol{p}} = \gamma^{-\frac{1}{3}}\boldsymbol{p},$$

于是, 得

$$\gamma^{-\frac{2}{3}}H = \tilde{H} = \frac{1}{2}\left(\tilde{P}_\rho^2 + \tilde{P}_z^2 + \frac{\tilde{l}_z^2}{\tilde{\rho}^2}\right) - \frac{1}{\sqrt{\tilde{\rho}^2 + \tilde{z}^2}} + \frac{1}{8}\tilde{\rho}^2.$$

这里忽略塞曼项, 相当于作定态能量平移. 或者说这里采用了以 Larmor 频率 $\omega_l = \frac{\gamma}{2}$ 绕 z 轴做匀速旋转的坐标, 使上式中塞曼项消失, 成为含参量 $\tilde{l}_z$ 的两个自由度体系哈密顿量, 且在作标度化变换后, 经典动力学仅依赖标度变量 ϵ

$$\epsilon = E\gamma^{-\frac{2}{3}}$$

分析体系在相空间能量曲面 $\tilde{H} = \epsilon$ 上运动.

为消除 $\tilde{H}$ 在 $\tilde{r} = \sqrt{\tilde{\rho}^2 + \tilde{z}^2} = 0$ 处的奇异性, 引入准抛物坐标

$$\tilde{r} = \frac{1}{2}(\mu^2 + \nu^2), \quad \tilde{z} = \frac{1}{2}(\mu^2 - z^2), \quad \rho = \mu\nu$$

及相应的标度时间变量

$$\mathrm{d}t = 2\tilde{r}d\tau = (\mu^2 + \nu^2)\mathrm{d}\tau.$$

相应地

$$P_\rho = \frac{1}{\mu^2 + \nu^2}(\mu P_\nu + \nu P_\mu), \quad P_z = \frac{1}{\mu^2 + \nu^2}(-\nu P_\nu + \mu P_\mu),$$

其中,

$$P_\mu = \frac{\mathrm{d}\mu}{\mathrm{d}\tau}, \quad P_\nu = \frac{\mathrm{d}\nu}{\mathrm{d}\tau}.$$

于是

$$\tilde{H} = \frac{1}{2(\mu^2 + \nu^2)}\left[P_\mu^2 + P_\nu^2 + l_z^2\left(\frac{1}{\mu^2} + \frac{1}{\nu^2}\right) - 4\right] + \frac{1}{8}\tilde{\rho}^2 = \epsilon.$$

引入正则化哈密顿量

$$h = \frac{1}{2}\left(P_\mu^2 + \frac{l_z^2}{\mu^2} + P_\nu^2 + \frac{l_z^2}{\nu^2}\right) - \epsilon(\mu^2 + \nu^2) + \frac{1}{8}\mu^2\nu^2(\mu^2 + \nu^2) = 2,$$

对 $\epsilon < 0$, 相当于二维耦合非线性振子 (频率为 $\omega = \sqrt{-2\epsilon}$, 由原逆磁项 $\mu^2\nu^2(\mu^2 + \nu^2)$ 耦合).

KAM 环面破缺分析 分析相空间固定 ϵ 的三维环面上 $\mu = 0$ 的 Poincare 截面上粒子相空间轨迹. 在均匀磁场中氢原子体系经典运动并不分别依赖于能量 $\boldsymbol{E}$ 与场强 γ, 而是仅依赖于标度能量①$\epsilon = \gamma^{-\frac{2}{3}}E$. 在接近自由粒子极限 $\epsilon \to -\infty$, 经典运动是正则的可禁闭在不变环上. 在 $\epsilon \approx -0.35$, 存在突然转变为混沌运动区, 而在 $\epsilon = 0.127\ 268\ 612$ 最后 KAM 环面破缺.

对碱金属原子在电离阈附近吸收谱的测量, 表明原子在磁场中存在准朗道共振现象. 对此, 可应用半经典近似分析共振结构, 分析氢原子在磁场中不稳定经典周期轨迹之后, 杜孟利和 Delos②利用路径积分半经典表达式, 考虑到电子的初态波函数 $\psi_i(q)$ 在原子核附近的分布, 指出吸收光子后电子的运动轨迹相对要大得多, 在计算振子强度分布时, 只需考虑过原点的闭合轨道的贡献. 他们在计算中考虑了具有较短周期的 65 个闭合轨道的贡献, 计算结果与实验基本符合.

---

① Frieduch H, Wintgen D. 1989. Phys. Rep., (183): 37.
② Du M L, Delos J B. 1988. Phys.Rev.A, (38): 1896.

习　题　9

1. 当仅一束缚态, 散射数据

$$B(x)=\rho \mathrm{e}^{-\kappa x}$$

由 GLM 方程

$$K(x,z)+\rho \mathrm{e}^{-\kappa(x+z)}+\int_x^{\infty}\mathrm{d}yK(x,y)\rho \mathrm{e}^{-\kappa(y+z)}=0$$

请解出散射势 $u(x)$.



附录A　高 斯 积 分

1. 基本高斯公式

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}y \mathrm{e}^{-ay^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}. \tag{A.1}$$

利用参数微分可证

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}y y^2 \mathrm{e}^{-ay^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \frac{1}{2a},$$
$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}y y^4 \mathrm{e}^{-ay^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \frac{3}{4a^2},$$
$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}y y^6 \mathrm{e}^{-ay^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \frac{15}{8a^3}.$$

用数学归纳法可得

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}y y^{2n} \mathrm{e}^{-ay^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \frac{(2n-1)!!}{(2a)^n} = \frac{\Gamma\left(n+\frac{1}{2}\right)}{a^{n+\frac{1}{2}}} \tag{A.2}$$

2. 配方积分

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}y \mathrm{e}^{-ay^2+by} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \mathrm{e}^{\frac{b^2}{4a}}, \tag{A.3}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}y y \mathrm{e}^{-ay^2+by} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \left(\frac{b}{2a}\right) \mathrm{e}^{\frac{b^2}{4a}},$$
$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}y y^2 \mathrm{e}^{-ay^2+by} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \left(\frac{1}{2a}\right) \left(1+\frac{b^2}{2a}\right) \mathrm{e}^{\frac{b^2}{4a}}.$$

3.

$$\int_{0}^{+\infty} \mathrm{d}y \mathrm{e}^{-ay^2-\frac{c}{y^2}} = \sqrt{\frac{\pi}{4a}} \mathrm{e}^{-2\sqrt{ac}}. \tag{A.4}$$

4. Fresnel 积分

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}y \mathrm{e}^{\mathrm{i}ay^2} = \sqrt{\frac{\mathrm{i}\pi}{a}} = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\pi}{4}}\sqrt{\frac{\pi}{a}}, \tag{A.5}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}y \mathrm{e}^{\mathrm{i}(ay^2+by)} = \sqrt{\frac{\mathrm{i}\pi}{a}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{b^2}{4a}}. \tag{A.6}$$

5. 高维推广, 利用实对称矩阵可以用正交矩阵对角化, 可证

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\cdots\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x_1\cdots \mathrm{d}x_n \exp\left\{-\frac{1}{2}\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{x}+\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{x}\right\}$$

$$= \sqrt{\frac{(2\pi)^n}{\det \boldsymbol{A}}}\exp\left\{\frac{1}{2}\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{A}^{-1}\cdot\boldsymbol{b}\right\}, \tag{A.7}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\cdots\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x_1\cdots \mathrm{d}x_n \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{2}\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{x}+\mathrm{i}\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{x}\right\}$$

$$= \sqrt{\frac{(\mathrm{i}2\pi)^n}{\det \boldsymbol{A}}}\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{2}\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{A}^{-1}\cdot\boldsymbol{b}\right\}. \tag{A.8}$$

其中, $A=(A_{ij})$ 为实对称矩阵.

6. 全纯变量高斯积分

令

$$z = x+\mathrm{i}y,$$

积分测度

$$\mathrm{d}\bar{z}\wedge \mathrm{d}z = 2\mathrm{i}\mathrm{d}x\wedge \mathrm{d}y,$$

那么

$$\int \frac{\mathrm{d}\bar{z}\mathrm{d}z}{\mathrm{i}2\pi}\mathrm{e}^{-a\bar{z}z} = \int \frac{\mathrm{d}x\mathrm{d}y}{\pi}\mathrm{e}^{-a(x^2+y^2)} = \frac{1}{a}.$$

于是利用厄米矩阵可用幺正矩阵对角化, 可证

$$\int \prod_{k=1}^{n} \frac{\mathrm{d}\bar{z}_k\mathrm{d}z_k}{\mathrm{i}2\pi}\mathrm{e}^{-\sum_{i,j}\bar{z}_i A_{ij} z_j} = \frac{1}{\det A} = \mathrm{e}^{-\mathrm{tr}\ln A}, \tag{A.9}$$

$$\int \prod_{k=1}^{n} \frac{\mathrm{d}\bar{z}_k\mathrm{d}z_k}{\mathrm{i}2\pi}\mathrm{e}^{-\sum_{i,j}\bar{z}_i A_{ij} z_j+\sum_{j}(\bar{b}_j z_j+\bar{z}_j b_j)} = \frac{1}{\det A}\mathrm{e}^{\sum_j \bar{b}_i \Delta_{ij} b_j}, \quad \boldsymbol{\Delta} = A^{-1}, \tag{A.10}$$

其中, $A^{+}=A$, A 为厄米矩阵.

附录B　狄拉克 δ 函数

B1　狄拉克 δ 函数的定义与性质

狄拉克 δ 函数为偶函数

$$\delta(x-y)=\delta(y-x). \tag{B.1}$$

其特点：除在 $x=y$ 点外,$\delta(x-y)=0$, 而在 $x=y$ 点, $\lim\limits_{(x-y)\to 0}\delta(x-y)\to\infty$. 使

$$\int_{a<y}^{b>y}\delta(x-y)\mathrm{d}x=1. \tag{B.2}$$

对于任意光滑函数 $f(x)$, 有

$$\int_{a<y}^{b>y}f(x)\delta(x-y)\mathrm{d}x=f(y). \tag{B.3}$$

δ 函数具有如下性质：

$$f(x)\delta(x-y)=f(y)\delta(x-y), \tag{B.4}$$

$$x\delta(x)=0. \tag{B.5}$$

当 $f(x)$ 有某些零点 x_n, 且 $f'(x_n)\neq 0$,

$$\delta(f(x))=\sum_n\frac{\delta(x-x_n)}{|f'(x_n)|}. \tag{B.6}$$

例如

$$\delta(x^2-a^2)=\frac{1}{2a}(\delta(x-a)+\delta(x+a)),$$

当 $a>0$ 时, 有

$$\delta(ax-b)=\frac{1}{a}\delta\left(x-\frac{b}{a}\right).$$

B2　δ 函数的微分、积分及相关函数

$\delta'(x)$ 满足

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\delta'(x)f(x)=-f'(0). \tag{B.7}$$

$\delta^n(x)$ 满足

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x \delta^n(x) f(x) = (-1)^n f^n(0). \tag{B.8}$$

Step 函数

$$\theta(x) = \begin{cases} 1, & \text{当 } x > 0, \\ 0, & \text{当 } x < 0. \end{cases}$$

Sign 函数

$$\epsilon(x) = \begin{cases} +1, & \text{当 } x > 0, \\ -1, & \text{当 } x < 0. \end{cases}$$

它们具有以下性质:

$$|x| = x\epsilon(x), \tag{B.9}$$

$$\theta(x) + \theta(-x) = 1, \tag{B.10}$$

$$\theta(x) - \theta(-x) = \epsilon(x). \tag{B.11}$$

微分造成奇异函数更奇异:

$$\frac{\mathrm{d}|x|}{\mathrm{d}x} = \epsilon(x),$$

$$\frac{\mathrm{d}\epsilon(x)}{\mathrm{d}x} = 2\delta(x),$$

$$\delta(x) = \frac{\mathrm{d}\theta(x)}{\mathrm{d}x} = \frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}\epsilon(x)}{\mathrm{d}x} = \frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2|x|}{\mathrm{d}x^2};$$

而积分使它们较光滑

$$\theta(x) = \int_{-\infty}^{x} \mathrm{d}y\delta(y),$$

$$\epsilon(x) = -1 + 2\int_{-\infty}^{x} \mathrm{d}y\delta(y). \tag{B.12}$$

B3　δ 函数的各种渐近表示

δ 分布的各种渐近表示常用的有

$$\delta(x-y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \lim_{\epsilon \to 0^+} \left(\frac{1}{\sqrt{\epsilon}} \mathrm{e}^{-\frac{(x-y)^2}{\epsilon}} \right), \tag{B.13}$$

$$\delta(x-y) = \frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \to 0^+} \left(\frac{\epsilon}{\epsilon^2 + (x-y)^2} \right), \tag{B.14}$$

$$\delta(x-y) = \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \lim_{\epsilon \to 0^+} \left(\frac{1}{x-y-\mathrm{i}\epsilon} - \frac{1}{x-y+\mathrm{i}\epsilon} \right), \tag{B.15}$$

$$\delta(x-y)=\lim_{\epsilon\to 0^+}\frac{1}{\pi(x-y)}\sin\frac{x-y}{\epsilon}, \tag{B.16}$$

$$\delta(x-y)=\lim_{\epsilon\to 0^+}\frac{1}{\epsilon}\theta\left(\frac{\epsilon}{2}-|x-y|\right). \tag{B.17}$$

这里很容易验证上面的表达式确实是 δ 函数, 如 (B.13) 式可用 $\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\mathrm{e}^{-x^2}=1$, (B.14) 式可用 $\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}x}{1+x^2}=1$, (B.16) 式可用 $\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\frac{\sin ax}{x}=\epsilon(a)$.

另外对沿实轴积分的积分核

$$\frac{1}{x\mp \mathrm{i}\epsilon}=P\left(\frac{1}{x}\right)\pm \mathrm{i}\pi\delta(x), \tag{B.18}$$

(B.18) 式 P 代表取积分主值, 即当沿实轴积分, 遇到奇点

$$\int_{-R}^{R}\mathrm{d}xP\left(\frac{1}{x}\right)\equiv\lim_{\delta\to 0}\left(\int_{-R}^{-\delta}\frac{\mathrm{d}x}{x}+\int_{\delta}^{R}\frac{\mathrm{d}x}{x}\right),$$

也存在各种傅里叶级数展式. 例如

$$\delta(x)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}k\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}, \tag{B.19}$$

$$\theta(x)=\lim_{\epsilon\to 0^+}\frac{1}{\mathrm{i}2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}k\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}}{k-\mathrm{i}\varepsilon}. \tag{B.20}$$

当 $x>0$, 将 k 沿实轴积分, 可再补充由上半周返回, 利用回路积分知 (B.20) 式 $\theta(x>0)=1$. 类似可证 $\theta(x<0)=0$.

B4　δ 函数的正交完备集表达式

δ 函数常可用各种正交完备集表达. 例如, 在有限区间 $-L\leqslant x\leqslant L$, 集合 $\{\psi_n(x)\}=\sqrt{\frac{1}{L}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\pi 2nx}{L}}$ 满足

$$\begin{cases}\text{正交归一} & \int_{-L}^{+L}\mathrm{d}x\psi_n^*(x)\psi_m(x)=\delta_{nm}.\\ \text{完备条件} & \lim_{N\to\infty}\sum_{n=0}^{N}\psi_n^*(x)\psi_n(y)=\delta(x-y).\end{cases}$$

另一方面, 对连续谱 $\left\{\psi_k(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\right\}$ 满足

$$\begin{cases}\text{正交归一} & \int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\psi_k^*(x)\psi_{k'}(x)=\delta(k-k').\\ \text{完备条件} & \int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}k\psi_k^*(x)\psi_k(y)=\delta(x-y).\end{cases} \tag{B.21}$$

(B.21) 式即 δ 函数满足的傅里叶级数展式.

$$\delta(x-y)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}k\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(x-y)}.$$

B5　有限区域边值问题

下面分析在有限区间 $0\leqslant x\leqslant L$ 的边值问题. 分析讨论一维 Laplace 算子 $-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}$ 的本征函数及其相关 δ 函数.

1. Dirichlet 边界条件

$$\phi(0)=0=\phi(L),\quad \phi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{n\pi x}{L},\quad n\in\mathbb{N},$$

$$\delta(x-y)=\frac{2}{L}\sum_{n\in\mathbb{N}}\sin\frac{n\pi y}{L}\sin\frac{n\pi x}{L}\quad(0\leqslant x,y\leqslant L),$$

$$\frac{2}{L}\int_0^L\mathrm{d}x\sin\frac{n\pi x}{L}\sin\frac{m\pi x}{L}=\delta_{nm}\quad(n,m\in\mathbb{N}).$$

2. Neumann 边界条件

$$\phi'(0)=0=\phi'(L),\quad \phi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{L}}\cos\frac{n\pi x}{L},\quad n\in\mathbb{N},\quad \phi_0=\sqrt{\frac{1}{L}}.$$

$$\delta(x-y)=\frac{1}{L}\sum_{n\in\mathbb{Z}}\cos\frac{n\pi y}{L}\cos\frac{n\pi x}{L}\quad(0\leqslant x,y\leqslant L).\tag{B.22}$$

3. 周期边界条件

$$\phi(0)=\phi(L),\quad \phi'(0)=\phi'(L),\quad \phi_n(x)=\sqrt{\frac{1}{L}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi 2nx/L},\quad n\in\mathbb{Z},$$

$$\delta(x-y)=\frac{1}{L}\sum_{n\in\mathbb{Z}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi 2n(x-y)/L}=\frac{1}{L}\left[1+2\sum_{n=1}^{\infty}\cos\left(\frac{\pi 2n(x-y)}{L}\right)\right],\quad(0\leqslant x,y\leqslant L).\tag{B.23}$$

(B.23) 式当 $y=0$ 即

$$\delta(x)=\frac{1}{L}\sum_{n\in\mathbb{Z}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi 2nx/L}.\tag{B.24}$$

(B.24) 式 x 限制在 $0\leqslant x\leqslant L$, 可进一步将 x 周期性延拓在整个实轴而得

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty}\delta(x-mL)=\frac{1}{L}\sum_{n\in\mathbb{Z}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi 2nx/L}.\tag{B.25}$$

令 $L=2\pi$, (B.25) 式即

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty}\delta(x-m2\pi)=\frac{1}{2\pi}\sum_{n\in\mathbb{Z}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}nx}.\tag{B.26}$$

再令 $x = y2\pi$, (B.26) 式即

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta(y-m) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi 2ny}. \tag{B.27}$$

(B.27) 式即泊松求和公式.

B6 泊松求和公式的各种表达式

(B.25) 式两边乘 $F(x)$ 并积分得

$$\begin{aligned}\sum_{N=-\infty}^{+\infty} F(NL) &= \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{L}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x F(x)\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi nx/L},\\ \sum_{N=-\infty}^{+\infty} F(N2\pi) &= \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x F(x)\mathrm{e}^{\mathrm{i}nx}.\end{aligned}$$

将 $F(x) = \mathrm{e}^{-\alpha^2 x^2}$, 代入上式得

$$\sum_{N=-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\alpha^2(2\pi N)^2} = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2\alpha\sqrt{\pi}}\mathrm{e}^{-n^2/4\alpha^2}. \tag{B.28}$$

使对参数 α 展开收敛慢的级数, 表达成收敛快的级数.

附录C　二阶线性常微分方程与格林函数

二阶线性常微分方程

$$\hat{L}\psi(x) \equiv -\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + q(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + r(x)\right]\psi(x) = f(x). \tag{C.1}$$

相应算子 $\hat{L}$ 的齐次方程解 $\phi(x)$ 满足:

$$\hat{L}\phi(x) \equiv -\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + q(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + r(x)\right]\phi(x) = 0. \tag{C.2}$$

非齐次方程 (C.1) 的通解 $\psi(x)$ 可表示为

$$\psi(x) = \phi(x) + \psi_p(x), \tag{C.3}$$

其中, $\psi_p(x)$ 为方程 (C.1) 的特解.

齐次方程 (C.2) 意味着叠加原理. 其解的任意线性组合本身仍然是解, 二阶微分方程 (C.1) 的通解含两可调参数. 可采用下面条件来确定:

(1) 初值问题 (IVP), 要求

$$\psi(x_1) = a, \quad \psi'(x_1) = u.$$

(2) 边值问题 (BVP), 可采用

① Dirichlet 边界条件　$\psi(x_1) = a, \quad \psi(x_2) = b.$

② Neumann 边界条件　$\psi'(x_1) = u, \quad \psi'(x_2) = v.$

而方程 (C.1) 的特解为

$$\psi_p(x) = \int_{x_1}^{x_2} \mathrm{d}y G(x;y) f(y), \tag{C.4}$$

其中, 格林函数 $G(x;y)$ 满足

$$\hat{L}G(x;y) \equiv -\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + q(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + r(x)\right]G(x;y) = \delta(x-y) \tag{C.5}$$

及相应边界条件. 我们需结合边界条件确定格林函数. 而初值问题与边值问题解法非常不同, 下面分别讨论:

1. *初值问题*

所有初值问题均有解:

$$\psi(x)=\phi(x)+\psi_p(x),\quad \begin{cases}\phi(0)=a, & \phi'(0)=u,\\ \psi_p(0)=0, & \psi_p'(0)=0.\end{cases}$$

为满足以上条件, 格林函数 $G(x;y)$ 应满足

$$G(0;y)=0,\quad \frac{\partial}{\partial x}G(x;y)|_{x=0}=0, \tag{C.6}$$

则

$$\begin{aligned}\psi(x)&=\phi(x)+\int_0^\infty \mathrm{d}y\,\Theta(x-y)G(x;y)f(y)\\ &=\phi(x)+\int_0^x \mathrm{d}y\,G(x;y)f(y).\end{aligned}$$

可证

$$G(x;y)=\Theta(x-y)\frac{\phi_1(x)\phi_2(y)-\phi_2(x)\phi_1(y)}{W(y)}, \tag{C.7}$$

其中, ϕ_1,ϕ_2 为齐次方程的两个线性独立解, 而 $W=\phi_1\phi_2'-\phi_1'\phi_2\neq 0$.

2. *边值问题*

有些边值问题无解, 如 Dirichlet 边界条件 $\psi(x_1)=0=\psi(x_2)$, (C.1) 式一般无解.

当齐次方程存在如下两个线性独立解 $\phi_{1,2}, W=\phi_1\phi_2'-\phi_1'\phi_2\neq 0$.

$$\hat{L}\phi_{1,2}(x)=0,\quad \begin{cases}\phi_1(x_1)=0, & \phi_1\text{取左边界条件},\\ \phi_2(x_2)=0, & \phi_2\text{取右边界条件}.\end{cases}$$

$$\hat{L}G(x;a)=\delta(x-a),\quad G(x_1;a)=0,\quad G(x_2;a)=0. \tag{C.8}$$

存在如下解:

$$G(x;a)=-\frac{\Theta(a-x)\phi_1(x)\phi_2(a)+\Theta(x-a)\phi_1(a)\phi_2(x)}{W(a)}, \tag{C.9}$$

即

$$\begin{aligned}\psi(x)&=-\int_{x_1}^{x_2}\mathrm{d}y f(y)\frac{\Theta(y-x)\phi_1(x)\phi_2(y)+\Theta(x-y)\phi_1(y)\phi_2(x)}{W(y)}\\ &=-\frac{\phi_1(x)\displaystyle\int_x^{x_2}\mathrm{d}y f(y)\phi_2(y)}{W(y)}-\frac{\phi_2(x)\displaystyle\int_{x_1}^{x}\mathrm{d}y f(y)\phi_1(y)}{W(y)}.\end{aligned}$$

3. 广义格林函数

当 $\hat{L}$ 是厄米算子, 其边值问题本征值方程 $\hat{L}\phi_n = \lambda_n\phi_n$ 具有正交归一的完备基 $\{\phi_n\}$, 或用狄拉克符号, 完备基 $\{|n\rangle\}$:

$$\begin{cases} \text{正交归一} \quad \int_{x_1}^{x_2} \mathrm{d}x\phi_n^*(x)\phi_m(x) = \delta_{nm}, \quad \text{即} \quad \langle n|m\rangle = \delta_{nm}, \\ \text{完备条件} \quad \sum_n \phi_n^*(x)\phi_n(y) = \delta(x-y), \quad \text{即} \quad \sum_n |n\rangle\langle n| = I. \end{cases}$$

这时相应格林函数或广义格林函数可用 $\hat{L}$ 的本征函数展开, 存在下面情况:

(1) 当 $\hat{L}$ 无零模, 即其所有本征值非零, $\lambda_n \neq 0$, 则

$$\hat{L} = \sum_n \lambda_n |n\rangle\langle n|.$$

相应格林函数可表示为

$$\hat{G} = \sum_n \frac{1}{\lambda_n}|n\rangle\langle n|,$$

即 $\hat{L}\psi = f$ 存在唯一解

$$\psi(x) = \int_{x_1}^{x_2} \mathrm{d}yG(x;y)f(y), \tag{C.10}$$

其中,

$$G(x;y) = \sum_n \frac{1}{\lambda_n}\phi_n^*(y)\phi_n(x),$$

即

$$\hat{G} = \sum_n \frac{1}{\lambda_n}|n\rangle\langle n| = \hat{L}^{-1}, \tag{C.11}$$

满足

$$\hat{L}G(x,y) = \delta(x-y),$$

即

$$\hat{L}\hat{G} = I. \tag{C.12}$$

(2) 当 $\hat{L}$ 存在零模解: $\phi_0(x)$, $\lambda_0 = 0$. 即

$$\hat{L}\phi_0(x) = 0.$$

这时当 $\hat{L}\psi = f$ 的非齐次项 $f(x)$ 不与零模解 $\phi_0(x)$ 正交, 即

$$\int_{x_1}^{x_2} \mathrm{d}x\phi_0^*(x)f(x) \neq 0,$$

非齐次方程无解.

而对特殊情况, 即当 $f(x)$ 满足

$$\int_{x_1}^{x_2} \mathrm{d}x \phi_0^*(x) f(x) = 0,$$

可能存在解, 且解非唯一

$$\psi(x) = c\phi_0(x) + \int_{x_1}^{x_2} \mathrm{d}y \boldsymbol{G}(x,y) f(y), \tag{C.13}$$

其中,

$$\boldsymbol{G}(x,y) = \sum_n{}' \frac{1}{\lambda_n} \phi_n^*(y) \phi_n(x). \tag{C.14}$$

求和号上带撇表示不含零模. 它是在与零模解正交的空间上的格林函数, 称为广义格林函数, 满足

$$\hat{L}\boldsymbol{G}(x,y) = \delta(x-y) - \phi_0^*(y)\phi_0(x). \tag{C.15}$$

附录D　Laplace-Beltrami 算子与径向 $\delta(r)$ 函数

D1　Laplace-Beltrami 算子的本征值问题

N 维空间 Laplace-Beltrami 算子：

$$\boldsymbol{\Delta}_{LB} \equiv -\boldsymbol{\nabla}^2 \equiv -\frac{1}{\sqrt{g}}\partial_a(\sqrt{g}g^{ab}\partial_b), \qquad g = \det(g_{ab}), \quad a,b = 1,2,\cdots,N. \tag{D.1}$$

下面简单分析算子 $\boldsymbol{\Delta}_{LB} = -\boldsymbol{\nabla}^2$ 的本征值问题：$-\boldsymbol{\nabla}^2\psi_n = \lambda_n\psi_n$.

在有限区域, $-\boldsymbol{\nabla}^2$ 为厄米算子.

Dirichlet 边界条件, 其本征值：$\lambda_n > 0$, 无零本征值.

Neumann 边界条件, 其本征值：$\mu_n \geqslant 0$, 最低本征值为零. 且

$$\mu_n \leqslant \lambda_n, \quad \mu_1 < \lambda_1, \quad \mu_0 = 0, \quad \text{无 } \lambda_0.$$

在无界空间, 有

$$-\boldsymbol{\nabla}^2\psi_k = k^2\psi_k$$

本征函数 $\{\psi_k = (2\pi)^{-N/2}\exp\{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}\}\}$ 满足

$$\begin{cases} \displaystyle\int \mathrm{d}^N\boldsymbol{r}\psi_k^*(\boldsymbol{r})\psi_{k'}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{(2\pi)^N}\int \mathrm{d}^N\boldsymbol{r}\exp\{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r}\} = \delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'), \\ \displaystyle\int \mathrm{d}^N\boldsymbol{k}\psi_k^*(\boldsymbol{r})\psi_k(\boldsymbol{r}') = \frac{1}{(2\pi)^N}\int \mathrm{d}^N\boldsymbol{k}\exp\{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\} = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'). \end{cases}$$

D2　三维空间谐和函数

Laplace-Beltrami 算子的零模, 即满足 laplace 方程 $\boldsymbol{\nabla}^2\psi = 0$, 称为谐和函数.

在三维欧空间, 空间球对称, 常采用球坐标

$$\mathrm{d}s^2 = \mathrm{d}r^2 + r^2\mathrm{d}\theta^2 + r^2\sin^2\theta\mathrm{d}\phi^2,$$

其协变度规为

$$g_{ab} = \mathrm{diag}(1, r^2, r^2\sin^2\theta),$$

逆变度规为

$$g^{ab} = \mathrm{diag}\left(1, \frac{1}{r^2}, \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\right),$$

行列式为

$$g=\det(g_{ab}),\quad \sqrt{g}=r^2\sin\theta.$$

Laplace-Beltrami 算子在球坐标下表示为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\Delta}_{LB}&=-\frac{1}{r^2\sin\theta}\partial_a(r^2\sin\theta g^{ab}\partial_b)\\&=-\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)-\frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]\\&=-\boldsymbol{\nabla}_r^2-\frac{1}{r^2}\boldsymbol{\nabla}_\Omega^2.\end{aligned}$$

三维空间谐和函数 (Laplace-Beltrami 算子的零模) 可表示为

$$\psi_{lm}(\boldsymbol{r})=(a_{lm}r^{-(l+1)}+b_{lm}r^l)Y_{lm}(\Omega),\quad l=0,1,2,\cdots.\quad |m|\leqslant l,\tag{D.2}$$

其中, $\{Y_{lm}(\Omega)\}$ 称为球谐和函数 (单位球面 S^2 上谐和函数), 满足

$$-\boldsymbol{\nabla}_\Omega^2Y_{lm}(\Omega)=l(l+1)Y_{lm}(\Omega),\quad -\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial\phi}Y_{lm}(\Omega)=mY_{lm}(\Omega),\tag{D.3}$$

$$\begin{cases}\text{正交归一}\quad \displaystyle\int\mathrm{d}\Omega Y_{lm}^*(\Omega)Y_{l'm'}(\Omega)=\delta_{ll'}\delta_{mm'},\\ \text{完备条件}\quad \displaystyle\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}Y_{lm}^*(\Omega')Y_{lm}(\Omega)=\delta(\Omega'-\Omega)\\ \qquad\qquad\qquad\qquad =\delta(\phi-\phi')(\cos\theta-\cos\theta').\end{cases}$$

球谐和函数 $\{Y_{lm}(\Omega)\}$ 具体表达式为

$$Y_{lm}(\Omega)=Y_{lm}(\theta,\phi)=\left[\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\right]^{\frac{1}{2}}(-1)^mP_l^{|m|}(\cos\theta)\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\phi},\tag{D.4}$$

其中, $P_l(\mu)$ 是算子

$$L=(1-\mu^2)\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\mu^2}-2\mu\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\mu}\quad(-1\leqslant\mu=\cos\theta\leqslant1)\tag{D.5}$$

的本征函数, 即

$$LP_l(\mu)=l(l+1)P_l(\mu),\quad l=0,1,2,\cdots,\tag{D.6}$$

$$\frac{1}{2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\mu')P_l(\mu)=\delta(\mu-\mu')\quad(-1\leqslant\mu,\mu'\leqslant1).\tag{D.7}$$

D3　二维空间谐和函数

在二维欧空间采用平面极坐标

$$ds^2 = dr^2 + r^2 d\phi^2, \tag{D.8}$$

Laplace-Beltrami 算子

$$-\boldsymbol{\nabla}^2 \equiv -\frac{1}{\sqrt{g}}\partial_a(\sqrt{g}g^{ab}\partial_b) = -\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}. \tag{D.9}$$

二维空间谐和函数 (Laplace-Beltrami) 算子的零模可表示为

$$\begin{aligned}
\psi_m(\boldsymbol{r}) &= (a_m r^{-|m|} + b_m r^{|m|})e^{im\phi}, \quad m = \pm1, \pm2, \cdots. \\
\psi_0(\boldsymbol{r}) &= a_0 \ln r + b_0.
\end{aligned}$$

这里 $\left\{\varPhi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi}\right\}$ 称为单位圆 S^1 上谐和函数, 满足

$$-\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\varPhi_m(\phi) = m^2\varPhi_m(\phi), \quad m = 0, \pm1, \pm2, \cdots. \tag{D.10}$$

其性质

$$\begin{cases}
\text{正交归一} & \displaystyle\int_0^{2\pi} d\phi \varPhi_m^*(\phi)\varPhi_{m'}(\phi) = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} d\phi e^{i(m-m')\phi} = \delta_{mm'}, \\
\text{完备条件} & \displaystyle\frac{1}{2\pi}\sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{im(\phi-\phi')} = \delta(\phi-\phi').
\end{cases}$$

D4　三维空间中 δ 函数及其径向 $\delta(r)$ 的定义与性质

在三维欧空间, 有

$$\begin{aligned}
\delta(\boldsymbol{r}) &= \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3\boldsymbol{k} \exp\{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}\} \\
&= \delta(x)\delta(y)\delta(z).
\end{aligned}$$

采用球坐标分离变量, 则有

$$\begin{aligned}
\delta(\boldsymbol{r}) &= \frac{1}{r^2}\delta(r-r')\delta(\Omega-\Omega') \\
&= \frac{1}{r^2}\delta(r-r')\delta(\phi-\phi')\delta(\cos\theta-\cos\theta') \\
&= \frac{1}{r^2}\delta(r-r')\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} Y_{lm}^*(\Omega)Y_{lm}(\Omega).
\end{aligned}$$

而对在原点 $\boldsymbol{r}=0$ 有定义的各向同性函数 $f(\boldsymbol{r})=f(r)$, 有

$$\delta(\boldsymbol{r})=\frac{\delta(r)}{4\pi r^2}\ ,\quad \boldsymbol{r}\in\mathbb{E}^3,$$

其中, 径向 $\delta(r)$ 的强定义为: 在 $0\leqslant r$ 且在端点 $r=0$ 有定义的函数 $f(r)$ 满足,

$$\int_0^{a>0}\mathrm{d}r\delta(r)f(r)=f(0).$$

$\delta(r)$ 具有性质:

$$\frac{\delta(r)}{r}=-\delta'(r),$$

$$\delta(r^2)=\frac{\delta(r)}{2r}$$

和

$$\delta(r^2-a^2)=\frac{1}{2\mid a\mid}[\delta(r-\mid a\mid)+\delta(r+\mid a\mid)=\frac{1}{2\mid a\mid}\delta(r-\mid a\mid).$$

在无边界区域自由格林函数 $G(\boldsymbol{r},0)$ 满足

$$-\boldsymbol{\nabla}^2G(\boldsymbol{r},0)=\delta(\boldsymbol{r}),\quad \text{Dirichlet 边界条件为 } G(\boldsymbol{r},0)\mid_{r\to\infty}=0 \tag{D.11}$$

$$\Rightarrow\qquad G(\boldsymbol{r},0)=\frac{1}{4\pi r}. \tag{D.12}$$

D5　二维空间中 δ 函数

类似可讨论二维空间中 δ 函数, 采用平面极坐标, 则

$$\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')=\frac{1}{r}\delta(r-r')\delta(\phi-\phi'), \tag{D.13}$$

而对在原点 $\boldsymbol{r}=0$ 有定义的函数 $f(\boldsymbol{r})=f(r)$, 有

$$\delta(\boldsymbol{r})=\frac{\delta(r)}{2\pi r},\quad \boldsymbol{r}\in\mathbb{E}^2. \tag{D.14}$$

在无边界区域自由格林函数 $G(\boldsymbol{r},0)$ 满足 (Dirichlet 边界条件无解)

$$-\boldsymbol{\nabla}^2G(\boldsymbol{r},0)=\delta(\boldsymbol{r})\quad \text{Neumann边界条件}: \boldsymbol{\nabla}G(\boldsymbol{r},0)\mid_{r\to\infty}=-\frac{\boldsymbol{r}}{2\pi r} \tag{D.15}$$

$$\Rightarrow G(\boldsymbol{r},0)=\frac{1}{2\pi}\ln\frac{a}{r}. \tag{D.16}$$

D6　$\boldsymbol{k}$ 空间格林函数 $\mathcal{G}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';\boldsymbol{k})$

k 空间格林函数 $\mathcal{G}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';k)$ 满足

$$-(\boldsymbol{\nabla}^2+k^2)\mathcal{G}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';k)=\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'), \tag{D.17}$$

其解可表示为

$$\mathcal{G}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';k)=\int\frac{\mathrm{d}^n\boldsymbol{k}'}{(2\pi)^n}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}}{k'^2-k^2}. \tag{D.18}$$

积分区域由相应散射问题边界条件决定.

在三维空间其表示式为①

$$\mathcal{G}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';k)=\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{4\pi|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}. \tag{D.19}$$

在二维空间其表示式为

$$\mathcal{G}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';k)=\frac{\mathrm{i}}{4}H_0^{(1)}(k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|). \tag{D.20}$$

式中, $H_0^{(1)}$ 为第三类贝塞尔 (Bessel) 函数.

在一维空间其表示式为

$$\mathcal{G}(x,x';k)=\frac{\mathrm{i}}{2k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|x-x'|}. \tag{D.21}$$

① 王竹溪, 郭敦仁. 2000. 特殊函数概论. 北京: 北京大学出版社.

附录E　作用量泛函及泛函变分, 涨落方程及雅可比场方程

泛函是指函数空间 $\{f(x)\}$ 到实数的映射, 例如

$$F[f]=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}xf(x)$$

以整个函数 $f(x)$ 为宗量, 得到某数值 $F[f]$, 这里方括号表示是对整个函数 $f(x)$ 的倚赖. 例如, 经典力学中常分析作用量泛函

$$S[q(t)]=\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}tL(q(t),\dot{q}(t)),$$

右端是沿某经典轨道 $q(t)$ 的积分, 而作用量 S 依赖于整个轨道, $S=S[q(t)]$ 是轨道的泛函. 经典轨道使作用量取稳定极值, 即要求对 $S[q(t)]$ 作泛函变分为零. 例如, 计算泛函 $F[f]=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}xf(x)$ 变分, 即

$$\frac{\delta F[f(x)]}{\delta f(y)}=\lim_{\epsilon\to 0}\frac{F[f(x)+\epsilon\delta(x-y)]-F[f(x)]}{\epsilon}=\int\mathrm{d}x\delta(x-y)=1.$$

对作用量 $L=\dfrac{1}{2}m\dot{x}^2-V(x,t)$ 的经典力学体系, 其作用量泛函为

$$S[x(t)]=\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\left(\frac{1}{2}m\dot{x}^2-V(x,t)\right).\tag{E.1}$$

利用变分公式

$$\frac{\delta x(t)}{\delta x(t')}=\delta(t-t'),\tag{E.2}$$

$$\delta'(t)f(t)=-\delta(t)f'(t).\tag{E.3}$$

可求出

$$\frac{\delta S[x(t)]}{\delta x(t')}=\int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\left(-m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}x(t)-\frac{\partial V(x,t)}{\partial x}\right)\delta(t-t'),\tag{E.4}$$

$$\frac{\delta^2 S[x(t)]}{\delta x(t')\delta x(t'')}=\left(-m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t'^2}-\frac{\partial^2 V(x,t')}{\partial x^2}\right)\delta(t''-t').\tag{E.5}$$

经典轨道 $x_c(t)$ 满足在边值固定下 $\delta S=0$ 极值条件, 即满足经典运动方程

$$m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}x(t)+\frac{\partial V(x,t)}{\partial x}=0,\quad x(t_a)=x_a,\quad x(t_b)=x_b. \tag{E.6}$$

极值稳定要求 $\delta^2 S>0$. $\delta^2 S$ 的本征方程, 即涨落方程

$$\left(-m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}-V''(x_c)\right)\eta_k(t)=\lambda_k\eta_k(t),\quad \eta_k(t_a)=0=\eta_k(t_b). \tag{E.7}$$

厄米算子 $\Lambda=-m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}-V''(x_c)$ 具有正交归一完备集 $\{\eta_k(t)\}$, 如果极值轨道 $x_c(t)$ 稳定, 则要求所有 $\lambda_k>0$.

经典动力学中还常常分析测地线偏离方程, 即沿测地线任意变分中, 使 $\delta^2 S$ 取最小正值的场, 称为雅可比场. 采用条件变分

$$\delta\int_0^T \mathrm{d}t[L(x_c,\dot{x}_c)-\lambda y(t)^2]=0,$$

约束条件 $\int_0^T \mathrm{d}t y(t)^2=1\neq 0$. 雅可比场满足偏离方程 (雅可比场方程)

$$\left(-m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}-V''(x_c)\right)y(t)=\lambda y(t),\quad y(t_a)=0,\quad y'(t_a)=\frac{1}{m}\neq 0, \tag{E.8}$$

$\dot{x}_c(t)$ 为沿经典轨道 $x_c(t)$ 的切场, 是雅可比场方程的零模 $(\lambda=0)$ 解. 注意 (E.8) 式取初值边界条件, 具有连续谱, 而雅可比场为与 $\dot{x}_c(t)$ 正交的场.

费恩曼传播函数的路径积分表示常快速振荡, 为分析其收敛性质, 常采用 Wick 转动 $(\mathrm{i}t\to\tau)$ 过渡到实欧氏空间. 作用量泛函 (E.1) 作 Wick 转动后, 可得到实欧氏空间中作用量泛函

$$S_E[x(\tau)]=\int_{\tau_a}^{\tau_b}\mathrm{d}\tau\left(\frac{m}{2}\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}\tau}\right)^2+V(x(\tau))\right), \tag{E.9}$$

以及欧氏空间费恩曼传播函数

$$K_E(x_b,\tau_b;x_a,\tau_a)=\mathcal{N}\int_{x_a}^{x_b}\mathrm{D}x(\tau)\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}S_E[x(\tau)]}. \tag{E.10}$$

由 $\delta S_E=0$ 得极值方程

$$m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2}x(\tau)-V'(x)=0,\quad x(\tau_a)=x_a,\quad x(\tau_b)=x_b \tag{E.11}$$

满足上面方程的解 $x_c(\tau)$, 此极值解稳定性要求分析 $\delta^2 S_E$ 的本征方程.

涨落方程

$$\left(-m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2}+V''(x_c)\right)\varphi_k(\tau)=\lambda_k\varphi_k(\tau),\quad \varphi_k(\tau_a)=0=\varphi_k(\tau_b) \tag{E.12}$$

及偏离方程 (雅可比场方程)

$$\left(-m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2}+V''(x_c)\right)\eta_\lambda(\tau)=\lambda\eta_\lambda(\tau),\quad \eta_\lambda(\tau_a)=0,\quad \eta'_\lambda(\tau_a)=\frac{1}{m}\neq 0. \tag{E.13}$$



参考书目

狄拉克. 1965. 量子力学原理. 陈咸亨译. 北京：北京大学出版社

倪光炯, 陈苏卿. 2005. 高等量子力学. 上海：复旦大学出版社

苏汝铿. 1997. 量子力学. 上海：复旦大学出版社

王竹溪, 郭敦仁. 2000. 特殊函数概论. 北京：北京大学出版社

曾谨言. 1998. 量子力学. 卷 I、卷 II. 北京：科学出版社

张礼, 葛墨林. 2000. 量子力学的前沿问题. 北京：清华大学出版社

张永德. 2002. 量子力学. 北京：科学出版社

Ashok, Das. 2006. Field Theory: A path Inetgral Approach. Singapore: World Scientific

Chaichian M, Demichev A. 2001. Path integral in physics. New York: Institute of Physics Publishing

Dittrich W, Reuter M. 1998. Classical and Quantum Dynamics. Berlin: Springer-Verlag

Feynman R P. 1965. Quantum Mechanics and Path Integrals. New York: MeGraw-Hill

Feynman R P. 1972. Statistics Mechanics, A set of lectures. Reading, MA: Benjamin

Gradshteyn I S, Ryzhik I M. 1980. Tables of Integrals, Series and Products. New York: Academic Press

Grovehe C, Scines F. 1998. Handbook of Feynman Path Integrals. Berlin: Springer-Verlag

Gutzwiller M C. 1992. Chaos in Classical and Quantum Mechanics. New York: Springer-Verlag

Harald J W, Müller-Kirsten. 2006. Introduction to Quantum Mechanics: Schrodinger Equation and Path Integral. Singapore: World Scientific

Kashiwa T, Qhnuki Y, Suyuki M. 1997. Path Integral Methods. Berlin: Oxford Science Press

Khandekas D C, Lewande S V, Bhagwat K V. 1993. Path Integral Methods and Their Application. Singapore: World Scientific

Kleinert H. 1990. Path Integral in Quantum Mechanics, Statistics and Polymer Physics. Singapore: World Scientific

Schultman L S. 1981. Techniques and Application of Path Integration. New York: John Wiley and Sons

Swanson M S. 1992. Path Integrals and Quantum Processes. Singapore: Academic press Inc

Zinn-Justin J. 2005. Path Integrals in Quantum Mechanics. Oxford: Oxford University Press

索　引

F

G

H

J

K

L

Y

Z

其他

《现代物理基础丛书》已出版书目

(按出版时间排序)

1. 现代声学理论基础　马大猷 著　2004.03
2. 物理学家用微分几何 (第二版)　侯伯元, 侯伯宇 著　2004.08
3. 数学物理方程及其近似方法　程建春 编著　2004.08
4. 计算物理学　马文淦 编著　2005.05
5. 相互作用的规范理论 (第二版)　戴元本 著　2005.07
6. 理论力学　张建树 等 编著　2005.08
7. 微分几何入门与广义相对论 (第二版)　梁灿彬, 周彬 著　2006.01
8. 物理学中的群论 (第二版)　马中骐 著　2006.02
9. 辐射和光场的量子统计　曹昌祺 著　2006.03
10. 实验物理中的概率和统计 (第二版)　朱永生 著　2006.04
11. 声学理论与工程应用　朱海潮 等 编著　2006.05
12. 高等原子分子物理学 (第二版)　徐克尊 著　2006.08
13. 大气声学 (第二版)　杨训仁, 陈宇 著　2007.06
14. 输运理论 (第二版)　黄祖洽 著　2008.01
15. 量子统计力学 (第二版)　张先蔚 编著　2008.02
16. 凝聚态物理的格林函数理论　王怀玉 著　2008.05
17. 激光光散射谱学　张明生 著　2008.05
18. 量子非阿贝尔规范场论　曹昌祺 著　2008.07
19. 狭义相对论(第二版)　刘　辽 编著　2008.07
20. 经典黑洞与量子黑洞　王永久 著　2008.08
21. **路径积分与量子物理导引　侯伯元 等 著　2008.09**